

## 10 Rozptyl

### Sférické Besselovy funkce

Sférické Besselovy funkce jsou dvě linárně nezávislá řešení diferenciální rovnice 2. řádu (někdy nazývané Helmholtzova rovnice)

$$\boxed{\left[ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left( 1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] \begin{matrix} j_l(z) \\ n_l(z) \end{matrix} = 0}. \quad (10.0.1)$$

- $j_l(z)$  se nazývá *sférická Besselova funkce* nebo *sférická Besselova funkce 1. druhu*.
- $n_l(z)$  se nazývá *sférická Neumannova funkce* nebo *sférická Besselova funkce 2. druhu*.
- Definují se také *sférické Hankelovy funkce 1. a 2. druhu* vztahy

$$h_l^{(1)}(z) \equiv j_l(z) + in_l(z),$$

$$h_l^{(2)}(z) \equiv j_l(z) - in_l(z).$$

$l$  je parametr (převážně celočíselný nezáporný, což budeme předpokládat v dalších výrazech, ale obecně může být reálný).

### Symetrie

$$j_l(z) = (-1)^l j_l(z),$$

$$n_l(z) = (-1)^{l+1} n_l(z),$$

$$h_l^{(1,2)}(z) = (-1)^l h_l^{(1,2)}(z).$$

### Vyjádření pomocí řady

$$j_l(z) = z^l \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (2l + 2n + 1)!!} \left( -\frac{z^2}{2} \right)^n$$
$$n_l(z) = -\frac{1}{z^{l+1}} \left\{ \sum_{n=0}^{l-1} \frac{(2l - 2n - 1)!!}{n!} \left( -\frac{z^2}{2} \right)^n + \frac{1}{l!} \left( \frac{z^2}{2} \right)^l \right.$$
$$\left. + (-1)^l \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{1}{n! (2n - 2l - 1)!!} \left( -\frac{z^2}{2} \right)^n \right\}$$

### Vyjádření pomocí goniometrických funkcí

$$j_l(z) = (-z)^l \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}$$

$$n_l(z) = -(-z)^l \left( \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}$$

**Asymptotika  $z \rightarrow 0$**

$$\boxed{\begin{aligned} j_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{z^l}{(2l+1)!!} \\ n_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow 0} \begin{cases} -\frac{1}{z} & \text{pokud } l = 0 \\ -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} & \text{pokud } l > 0 \end{cases} \end{aligned}} \quad (10.0.2)$$

Sférické Neumannovy funkce divergují pro  $z \rightarrow 0$ .

**Asymptotika  $z \rightarrow \infty$**

$$\boxed{\begin{aligned} j_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{\sin\left(z - l\frac{\pi}{2}\right)}{z} \\ n_l(z) &\xrightarrow{z \rightarrow \infty} -\frac{\cos\left(z - l\frac{\pi}{2}\right)}{z} \end{aligned}} \quad (10.0.3)$$

**Relace ortogonality**

$$\int_0^\infty j_l(kr)j_l(k'r)r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2}\delta(k - k') \quad (10.0.4)$$

**Rozklad exponenciály**

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^* \left( \frac{\mathbf{k}}{k} \right) Y_{lm} \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta), \end{aligned}$$

kde jsme zvolili souřadnou soustavu tak, že osa  $z$  je rovnoběžná s vektorem  $\mathbf{r}$ , takže

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos \theta.$$

**Explicitní vyjádření nejnižších Besselových funkcí**

$$\begin{aligned} j_0(z) &= \frac{\sin z}{z} & n_0(z) &= -\frac{\cos z}{z} \\ j_1(z) &= -\frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} & n_1(z) &= -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \\ j_2(z) &= \left( \frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \sin z - \frac{3}{z^2} \cos z & n_2(z) &= -\left( \frac{3}{z^3} - \frac{1}{z} \right) \cos z - \frac{3}{z^2} \sin z \end{aligned}$$

**Stacionární stavy volné částice s ostrou hodnotou impulsmomentu**

Vlnovou funkci volné částice s velikostí vlnového vektoru  $k$  zapíšeme jako

$$\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = \langle \mathbf{r} | k l m \rangle = R_{klm}(r) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Schrödingerova rovnice v tomto případě zní

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = E\psi_{klm}(r, \theta, \phi),$$

kde

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2},\end{aligned}$$

přičemž  $E = \hbar^2 k^2 / 2M$ . Po dosazení  $\mathbf{L}^2\psi_{klm}(r, \theta, \phi) = l(l+1)\psi_{klm}(r, \theta, \phi)$

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right]R_{kl}(r) &= 0 \\ \downarrow z = kr \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2}{z}\frac{\partial}{\partial z} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2}\right)\right]R_{kl}(z) &= 0\end{aligned}$$

což je přesně Helmholtzova rovnice pro sférické Besselovy funkce (10.0.1). Obecné řešení pro radiální část tedy zní

$$R_{kl}(r) = a_l(k)j_l(kr) + b_l(k)n_l(kr). \quad (10.0.5)$$

Sférická Neumannova funkce podle asymptotiky (10.0.2) diverguje pro  $r = 0$ , ve výsledném řešení se tudíž nebude vyskytovat. Užitím relací ortogonality (10.0.4) dostáváme normovanou radiální část vlnové funkce volné částice

$$R_{kl}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k j_l(kr).$$

## Rozvoj amplitudy rozptylu do parciálních vln

Asymptotická vlnová funkce částice rozptylující se na potenciálu  $V(\mathbf{r})$  je dána superpozicí rovinné vlny s vlnovým vektorem  $\mathbf{k}$  a rozptýlené kulové vlny

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (10.0.6)$$

přičemž  $k = k'$  a  $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$ . Amplituda rozptylu je

$$\begin{aligned}f(\cos\theta) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2M}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \\ &\approx -\frac{4\pi^2 M}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | \hat{V} | \mathbf{k} \rangle = \boxed{-\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}},\end{aligned} \quad (10.0.7)$$

kde poslední řádek je tzv. *Bornova aproximace* (1. člen Bornovy řady). Diferenciální účinný průřez rozptylu z amplitudy rozptylu je

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (10.0.8)$$

Pro sférický symetrický potenciál je výhodné rozložit amplitudu rozptylu do *parciálních vln*

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (10.0.9)$$

kde  $\cos \theta$  je úhel mezi směrem dopadající rovinné vlny daným vektorem  $\mathbf{k}$  a polohovým vektorem  $\mathbf{r}$

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}{kr},$$

$P_l(\cos \theta)$  je Legendreův polynom a  $f_l(k)$  *amplituda rozptylu  $l$ -té parciální vlny*. Dosažením tohoto rozvoje do (10.0.6) a z asymptotiky a srovnání s volnou částicí vyplývá vztah mezi  $f_l(k)$  a fázovým posunutím  $\delta_l(k)$

$$\left. \begin{aligned} f_l(k) &= \frac{1}{k} \sin \delta_l(k) e^{i\delta_l(k)} \\ \delta_l(k) &= \frac{1}{2i} \ln [2ik f_l(k) + 1] \end{aligned} \right\} \quad (10.0.10)$$

Amplitudu rozptylu  $l$ -té parciální vlny dostaneme přeintegrováním plné amplitudy rozptylu (10.0.9) s  $l$ -tým Legendreovým polynomem

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) P_l(\cos \theta) d \cos \theta &= \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) f_m(k) \int_{-1}^1 P_l(\cos \theta) P_m(\cos \theta) d \cos \theta \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) f_m(k) \frac{2}{2m+1} \delta_{ml} = 2f_l(k), \end{aligned}$$

kde jsme využili relací ortogonality Legendreových polynomů

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_l(x) dx = \frac{2}{2m+1} \delta_{ml}.$$

Dostáváme tedy

$$f_l(k) = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (10.0.11)$$

V první Bornově aproximaci se předpokládá, že je amplituda rozptylu malá. Využijeme přibližný vzorec pro logaritmus  $\ln(1+x) \approx x$ , platný pro  $x \ll 1$ , a z (10.0.10) dostaneme jednoduchý vztah

$$\delta_l(k) = k f_l(k) \quad (10.0.12)$$

Přeintegrováním vztahu pro diferenciální účinný průřez (10.0.8) dostaneme vztah mezi účinným průřezem pro  $l$ -tou parciální vlnu a jejím fázovým posunutím

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (10.0.13)$$

Celkový účinný průřez je pak

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k)$$

Fázové posunutí je kladné pro přitažlivé síly (záporný potenciál) a záporné pro odpudivé síly.

## 10.1 Gaussovský potenciál

Interakce je určena sféricky symetrickým potenciálem

$$V(r) = v e^{-\mu r^2},$$

kde  $v$  a  $\mu$  jsou reálné konstanty,  $\mu > 0$ .

1. Určete v Bornově aproximaci amplitudu rozptylu a diferenciální účinný průřez rozptylu na tomto potenciálu.
2. Určete fázové posunutí pro  $s$  vlnu.
3. Určete fázové posunutí pro  $p$  vlnu.

**Řešení:**

Předně označíme  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  a úhel mezi vektory  $\mathbf{k}$  a  $\mathbf{k}'$  jako  $\psi$ . Pak (využijeme toho, že  $k = k'$ )

$$q^2 = k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' + k'^2 = 2k^2 (1 - \cos \psi) = 4k^2 \sin^2 \frac{\psi}{2},$$

a tedy

$$q = 2k \sin \frac{\psi}{2}.$$

1. Amplitudu rozptylu spočítáme pomocí vzorce (10.0.7):

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{Mv}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-\mu r^2} d^3\mathbf{r} = \left| \begin{array}{l} \text{sférické souřadnice,} \\ \text{osa } z \text{ paralelní s } \mathbf{q} \\ \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} = qr \cos \theta \end{array} \right| \\ &= -\frac{Mv}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{iqr \cos \theta} e^{-\mu r^2} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \left| \begin{array}{l} u = \cos \theta \\ du = -\sin \theta d\theta \end{array} \right| \\ &= -\frac{Mv}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 e^{-\mu r^2} dr \int_{-1}^1 e^{iqr u} du \\ &= -\frac{Mv}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 e^{-\mu r^2} \left[ \frac{e^{iqr u}}{iqr} \right]_{-1}^1 dr = -\frac{Mv}{i\hbar^2} \int_0^\infty \left( e^{-\mu r^2 + iqr} - e^{-\mu r^2 - iqr} \right) r dr \\ &= -\frac{Mv}{i\hbar^2} e^{-\frac{q^2}{4\mu}} \int_0^\infty \left[ e^{-\mu \left(r - \frac{iq}{2\mu}\right)^2} - e^{-\mu \left(r + \frac{iq}{2\mu}\right)^2} \right] r dr = \left| \begin{array}{l} x = r - a \\ y = r + a \\ a = \frac{iq}{2\mu} \end{array} \right| \\ &= -\frac{Mv}{i\hbar^2} e^{-\frac{q^2}{4\mu}} \underbrace{\left[ \int_{-a}^\infty (x+a) e^{-\mu x^2} dx - \int_a^\infty (y-a) e^{-\mu y^2} dy \right]}_I. \end{aligned}$$

Integrál je

$$\begin{aligned}
 I &= \int_{-a}^0 x e^{-\mu x^2} dx + a \int_{-a}^0 e^{-\mu x^2} dx + \int_0^{\infty} x e^{-\mu x^2} dx + a \int_0^{\infty} e^{-\mu x^2} dx \\
 &\quad - \int_0^{\infty} x e^{-\mu x^2} dx + a \int_0^{\infty} e^{-\mu x^2} dx + \int_0^a x e^{-\mu x^2} dx - a \int_0^a e^{-\mu x^2} dx \\
 &= 2a \int_0^{\infty} e^{-\mu x^2} dx + \underbrace{\int_{-a}^a x e^{-\mu x^2} dx}_{0 \text{ (lichá funkce)}} + \underbrace{a \int_{-a}^0 e^{-\mu x^2} dx - a \int_0^a e^{-\mu x^2} dx}_{0 \text{ (sudá funkce)}} \\
 &= 2a \int_0^{\infty} e^{-\mu x^2} dx = a \sqrt{\frac{\pi}{\mu}},
 \end{aligned}$$

takže amplituda rozptylu je

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{Mv}{2\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{q^2}{4\mu}}$$

a diferenciální účinný průřez

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi(Mv)^2}{4\hbar^2\mu^3} e^{-\frac{q^2}{2\mu}}.$$

2. K výpočtu amplitudy rozptylu  $s$ -vlny ( $l = 0$ ) aplikujeme vzorec (10.0.11):

$$\begin{aligned}
 f_0(k) &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \int_{-1}^1 e^{-\frac{4k^2 \sin^2 \frac{\psi}{2}}{4\mu}} \underbrace{P_0(\cos \psi)}_1 d \cos \psi \\
 &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \int_{-1}^1 e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} dx \\
 &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left[ \frac{2\mu}{k^2} e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} \right]_{-1}^1 \\
 &= -\frac{Mv}{2\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left( 1 - e^{-\frac{k^2}{\mu}} \right) = -\frac{Mv}{\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \sinh \frac{k^2}{2\mu}.
 \end{aligned}$$

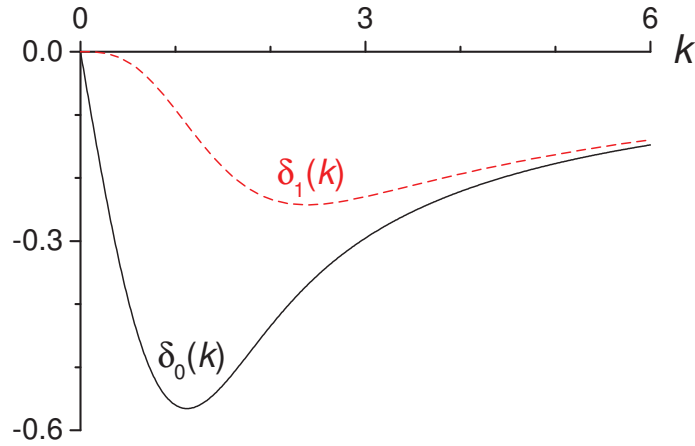
Fázové posunutí určíme pomocí přibližného vzorce (10.0.12)

$$\delta_0(k) \approx -\frac{Mv}{\hbar^2 k} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \sinh \frac{k^2}{2\mu}.$$

3. Amplitudu rozptylu a fázové posunutí  $p$ -vlny počítáme analogicky jako v předchozím

bodě:

$$\begin{aligned}
 f_0(k) &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \int_{-1}^1 e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} \underbrace{P_1(x)}_x dx = |\text{Per partes}| \\
 &= -\frac{Mv}{4\mu\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left\{ \left[ \frac{2\mu}{k^2} x e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} \right]_{-1}^1 - \frac{2\mu}{k^2} \int_{-1}^1 e^{-\frac{k^2}{2\mu}(1-x)} dx \right\} \\
 &= -\frac{Mv}{2\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} \left\{ 1 + e^{-\frac{k^2}{\mu}} - \frac{2\mu}{k^2} \left( 1 - e^{-\frac{k^2}{\mu}} \right) \right\} \\
 &= -\frac{Mv}{2\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \left\{ \left( e^{\frac{k^2}{2\mu}} + e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \right) - \frac{2\mu}{k^2} \left( e^{\frac{k^2}{2\mu}} - e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \right) \right\} \\
 &= -\frac{Mv}{\hbar^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \left[ \cosh \frac{k^2}{2\mu} - \frac{2\mu}{k^2} \sinh \frac{k^2}{2\mu} \right], \\
 \delta_1(k) &= -\frac{Mv}{\hbar^2 k} \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{-\frac{k^2}{2\mu}} \left[ \cosh \frac{k^2}{2\mu} - \frac{2\mu}{k^2} \sinh \frac{k^2}{2\mu} \right].
 \end{aligned}$$



Obrázek 9: Fázová posunutí  $s$  a  $p$  parciální vlny pro rozptyl na Gaussovském potenciálu v 1. Bornově aproximaci. Hodnoty parametrů jsou  $M = \hbar = v = \mu = 1$ .

Fázová posunutí pro  $s$  a  $p$  vlnu jsou znázorněna na obrázku 10.1.

## 10.2 Wronskián sférické Besselovy rovnice

Nalezněte, čemu se rovná Wronskián<sup>15</sup> sférických Besselových funkcí, tj. determinant

$$W_l(z) \equiv \det \begin{pmatrix} j_l(z) & n_l(z) \\ j_l'(z) & n_l'(z) \end{pmatrix} = j_l(z)n_l'(z) - j_l'(z)n_l(z).$$

<sup>15</sup> Nenulovost Wronskiánu zaručuje lineární nezávislost zúčastněných funkcí.

## Řešení:

Rovnici pro sférické Besselovy funkce (10.0.1) vynásobíme zleva sférickou Neumannovou funkcí a naopak. Výsledné rovnice od sebe odečteme:

$$\left. \begin{array}{l} n_l(z) \\ j_l(z) \end{array} \right| \begin{array}{l} \left[ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left( 1 + \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] j_l(z) = 0 \\ \left[ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left( 1 + \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] n_l(z) = 0 \end{array}$$

$$\begin{aligned} j_l''(z)n_l(z) - j_l(z)n_l''(z) + 2z(j_l'(z)n_l(z) - j_l(z)n_l'(z)) &= 0 \\ W_l'(z) + 2zW_l(z) &= 0 \end{aligned}$$

Obdrželi jsme diferenciální rovnici pro  $W(z)$ , jejíž řešení hledáme ve tvaru

$$W_l(z) = cz^\alpha.$$

Dosazením dostaneme  $\alpha = -2$ . Pro určení konstanty  $c$  nám stačí spočítat hodnotu Wronskiánu pro jedno konkrétní  $z$ . Využijme například asymptotiky  $z \rightarrow 0$  (10.0.2). Pro  $l \neq 0$  dostáváme

$$\begin{aligned} W_l(z \sim 0) &= \frac{z^l}{(2l+1)!!} \frac{d}{dz} \left( -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \right) + \frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \frac{d}{dz} \left( \frac{z^l}{(2l+1)!!} \right) \\ &= \frac{z^l}{(2l+1)!!} \frac{(l+1)(2l-1)!!}{z^{l+2}} + \frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \frac{lz^{l-1}}{(2l+1)!!} \\ &= \frac{1}{z^2} \frac{l+1}{2l+1} + \frac{1}{z^2} \frac{l}{2l+1} = \frac{1}{z^2} \end{aligned}$$

a pro  $l = 0$

$$W_0(z \sim 0) = 1 \frac{d}{dz} \left( -\frac{1}{z} \right) + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} 1 = \frac{1}{z^2}.$$

Wronskián sférických Besselových funkcí tedy je

$$\boxed{W_l(z) = j_l'(z)n_l(z) - j_l(z)n_l'(z) = \frac{1}{z^2}}. \quad (10.2.1)$$

### 10.3 Sférická dutina obalená $\delta$ -slupkou

Mějme částici rozptylující se na potenciálu

$$V(r) = \frac{v}{a} \delta(r-a)$$

(dutina obalená slupkou z  $\delta$ -funkce).

- Nalezněte radiální část vlnové funkce  $R_{kl}(r)$ .
- Určete fázové posunutí  $l$ -té parciální vlny  $\delta_l(k)$ .
- Určete totální účinný průřez  $l$ -té parciální vlny  $\sigma_l(k)$ .



## Řešení:

Až na oblast  $\delta$ -slupky máme vlastně volnou částici. Radiální část její vlnové funkce bude mít obecný tvar daný lineární kombinací sférické Besselovy a Neumannovy funkce (10.0.5). Uvnitř koule musí být

$$R_{kl}(r < a) = A_l(k)j_l(kr)$$

(odůvodnění stejné jako v případě volné částice, vlnová funkce nesmí divergovat v počátku).

Řešení vně koule zapišme jako

$$R_{kl}(r) = B_l(k) [\alpha_l(k)j_l(kr) + \beta_l(k)n_l(kr)]$$

což v asymptotice  $r \rightarrow \infty$  (10.0.3) dává

$$R_{kl}(r \rightarrow \infty) \rightarrow B_l(k) \left[ \alpha_l(k) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} - \beta_l(k) \frac{\cos(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} \right]$$

Asymptotika zcela volné částice, jejíž řešení je (10.0.5), zní

$$R_{kl}^{(0)}(r \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}. \quad (10.3.1)$$

V našem případě dojde k fázovému posunutí oproti řešení volné částice, které lze popsat pomocí veličiny  $\delta_l(k)$ :

$$\begin{aligned} R_{kl}(r \rightarrow \infty) &\rightarrow \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k))}{kr} = \\ &= \cos \delta_l(k) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} + \sin \delta_l(k) \frac{\cos(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} \end{aligned}$$

Srovnáním s předchozím vyjádřením (10.3.1) vidíme, že

$$\begin{aligned} \alpha_l(k) &= \cos \delta_l(k) \\ \beta_l(k) &= -\sin \delta_l(k) \end{aligned}$$

a vlnová funkce zapsaná pomocí fázového posunutí je

$$R_{kl}(r) = \begin{cases} A_l(k)j_l(kr) & \text{pro } r < a \\ B_l(k) [\cos \delta_l(k)j_l(kr) - \sin \delta_l(k)n_l(kr)] & \text{pro } r > a \end{cases}$$

Fázové posunutí určíme pomocí sešívací podmínky na slupce. Stejně jako v případě jednorozměrného potenciálu i zde musí platit dvě podmínky:

1. Vlnová funkce je spojitá

$$A_l(k)j_l(ka) = B_l(k) [\cos \delta_l(k)j_l(ka) - \sin \delta_l(k)n_l(ka)] \quad (10.3.2)$$

2. V derivaci je skok daný silou  $\delta$ -funkce (viz 5. cvičení zimního semestru)

$$R'_{kl}(a+0) - R'_{kl}(a-0) = \frac{2Mv}{\hbar^2 a} R_{kl}(a),$$

což v našem případě dává (pozor,  $R'_{kl} = \frac{d}{dr} R_{kl}$ , tj. derivujeme jen podle  $r$ )

$$kA_l(k) [\cos \delta_l(k) j'_l(ka) - \sin \delta_l(k) n'_l(ka)] - kB_l(k) j'_l(ka) = \frac{Q}{a} B_l(k) j_l(ka), \quad (10.3.3)$$

přičemž jsme označili  $Q \equiv 2mv/\hbar^2$ .

Dosazením z (10.3.2) do (10.3.3) dostaneme (nepíšu již argumenty funkcí)

$$\begin{aligned} j_l j'_l \cos \delta_l - j_l n'_l \sin \delta_l - j_l j'_l \cos \delta_l + j'_l n_l \sin \delta_l &= \frac{Q}{ka} j_l (j_l \cos \delta_l - n_l \sin \delta_l) \\ - (j_l n'_l - j'_l n_l) \sin \delta_l &= \frac{Q}{ka} j_l (j_l \cos \delta_l - n_l \sin \delta_l). \end{aligned}$$

Na levé straně se nám objevil Wronskián (10.2.1), za který dosadíme:

$$-\frac{1}{(ka)^2} \sin \delta_l = \frac{Q}{ka} j_l (j_l \cos \delta_l - n_l \sin \delta_l)$$

Z toho již získáme explicitní výraz pro fázové posunutí

$$\boxed{\operatorname{tg} \delta_l(k) = \frac{Q j_l^2(ka)}{Q j_l(ka) n_l(ka) - \frac{1}{ka}}} \quad (10.3.4)$$

Dále můžeme z podmínky spojitosti (10.3.2) určit *koeficient průniku*

$$P_l(k) \equiv \left| \frac{A_l(k)}{B_l(k)} \right|^2 = \frac{\cos \delta_l(k) j_l(ka) - \sin \delta_l(k) n_l(ka)}{j_l(ka)}, \quad (10.3.5)$$

kde dosadíme v tuto chvíli již známé fázové posunutí  $\delta_l(k)$ .

Nakonec určíme účinný průřez pro  $l$ -tou parciální vlnu. K tomu se bude hodit vztah (10.0.13). Mezi goniometrickými funkcemi platí

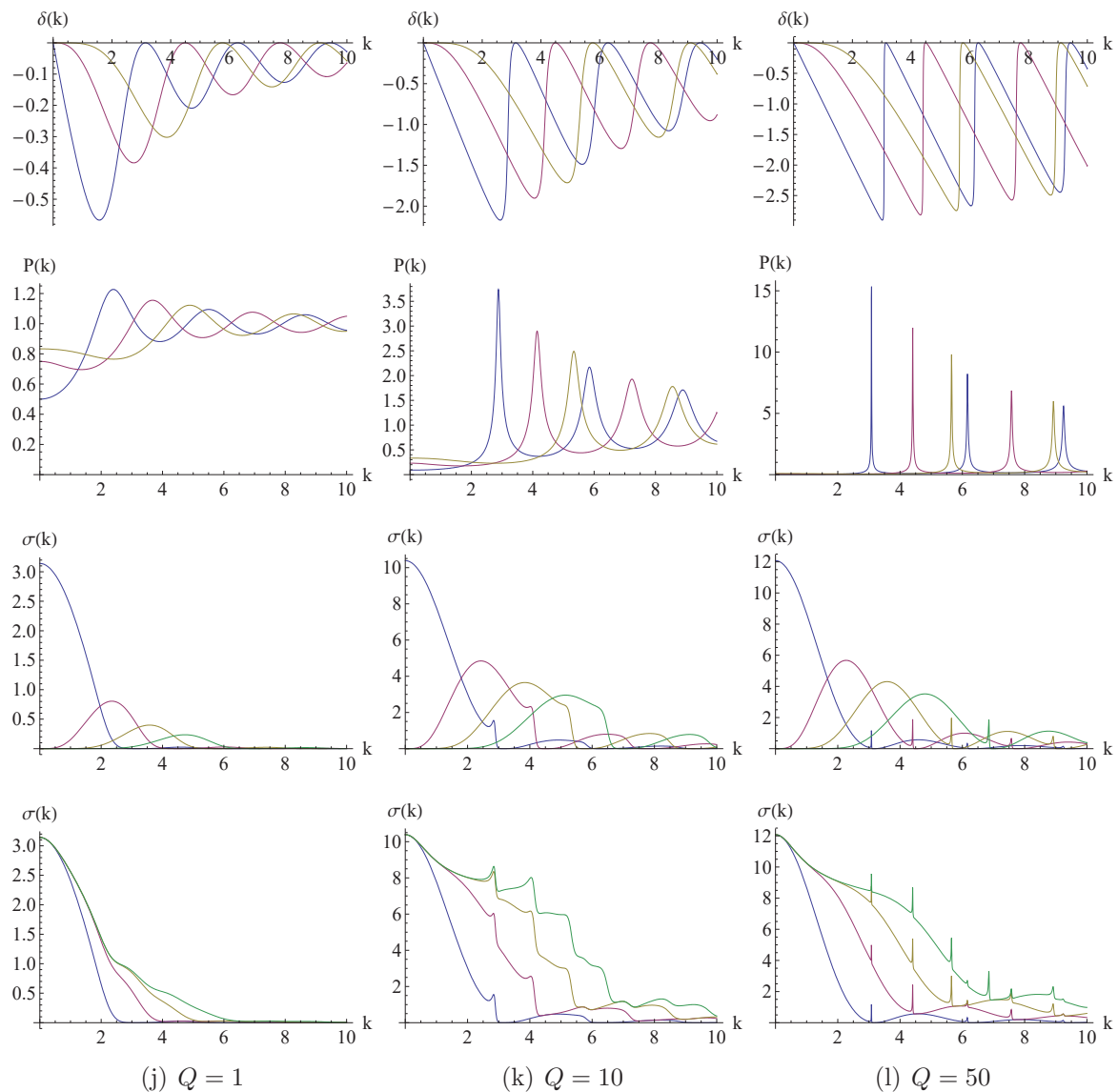
$$\sin^2 x = \frac{\operatorname{tg}^2 x}{1 + \operatorname{tg}^2 x}.$$

V našem případě

$$\begin{aligned} \sin^2 \delta_l(k) &= \frac{\operatorname{tg}^2 \delta_l(k)}{1 + \operatorname{tg}^2 \delta_l(k)} = \\ &= \frac{Q^2 j_l^4(ka)}{Q^2 j_l^4(ka) + [Q j_l(ka) n_l(ka) - \frac{1}{ka}]^2} \end{aligned}$$

a účinný průřez je tedy

$$\boxed{\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{Q^2 j_l^4(ka)}{Q^2 j_l^4(ka) + [Q j_l(ka) n_l(ka) - \frac{1}{ka}]^2}} \quad (10.3.6)$$



Obrázek 10: **1. řádek:** Fázové posunutí  $l$ -té parciální vlny  $\delta_l(k)$  podle (10.3.4) pro  $l = 0$  (modře),  $l = 1$  (fialově),  $l = 2$  (béžově). **2. řádek:** Koefficient průniku  $l$ -té parciální vlny  $P_l(k)$  podle (10.3.5). **3. řádek:** Účinný průřez  $l$ -té parciální vlny podle (10.3.6). **3. řádek:** Součet účinných průřezů  $\sigma_0$  (modře),  $\sigma_0 + \sigma_1$  (fialově),  $\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2$  (béžově),  $\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$  (zeleně). Vše je znázorněno pro různé hodnoty  $Q$ .

Hladina	1s	1p	1d	2s	1f	2p	1g	2d
$ka$	$\pi = 3.1$	4.5	5.8	$2\pi = 6.3$	7.0	7.7	8.2	9.1

Tabulka 1: Vázané stavy nekonečně hluboké sféricky symetrické jámy. Je užito spektroskopické značení  $s(l = 0)$ ,  $p(l = 1)$ ,  $d(l = 2)$ ,  $f(l = 3)$ ,  $g(l = 4)$ .

Na obrázku 10.3 jsou znázorněny výsledky pro nejnižší parciální vlny a pro různé síly potenciálu dané velikostí parametru  $Q$ . Čím je  $Q$  větší (potenciál silnější), tím jsou výraznější a ostřejší maxima v koeficientu průniku a v účinném průřezu. To je ukázka *rezonancí* (kvazivázaných stavů). Kdybychom spočítali vázané stavy nekonečně hluboké sférické dutiny s potenciálem

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pro } r < a \\ \infty & \text{pro } r > a \end{cases}$$

obdrželi bychom vázané stavy uvedené v tabulce 10.3. Jejich poloha dobře koresponduje s rezonančními maximy při velkých  $Q$ .

Z obrázku je také vidět, že pro malé hybnosti (energie)  $k$  přispívá k rozptylu prakticky jen  $s$ -vlna ( $l=0$ ).