תורת הפיזור

כמעט כל הידע לנו על מבנה הגרעין וחלקיקים אלמנטריים התקבל בניסויי פיזור, החל מניסויו של רתרפורד שהראה שהמטען החיובי ורוב המסה האטומית מרוכזים בגרעין קטן ביותר וכלה בעובדה שפרוטונים ונייטרונים מורכבים בעצמם מקווארקים, שלפי ידיעתנו הנוכחית הינם חלקיקים נקודתיים.

בניסוי פיזור אופייני אלומה של חלקיקים, בעלי אנרגיה שווה, נורית אל עבר מטרה (זו יכולה להיות [illegible] או אלומת חלקיקים אחרת) ומתפזרת ממנה. גלאים מודדים את כמות החלקיקים המתפזרת בכיוונים שונים. באופן אידיאלי אנו מעוניינים לכן לפתור את הבעיה התלויה בזמן בה החלקיק הפוגע מתואר על ידי חבילת גלים המתקדמת במרחב, פוגעת ומתפזרת כשמטרתנו הינה חישוב הסתברות למציאת החלקיק בכיוון מסוים זמן ארוך לאחר ההתנגשות. למעשה נפתור בעיה פשוטה יותר שאינה תלויה בזמן ונראה כי בתנאים מסוימים היא מספקת את התשובה לשאלה זו.

נניח כי ההמילטוניאן המתאר את המערכת הינו

$$H = H_0 + V(\vec{r})$$

כאשר $H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2M}$ ו- $V(\vec{r})$ הינו הפוטנציאל המפזר.

אם $|\phi\rangle$ הינו מצב עצמי של H_0 עם אנרגיה E:

$$H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

נחפש מצב עצמי $|\psi^{(+)}\rangle$ של H בעל אותה אנרגיה E:

$$(1) \quad (H_0+V)|\psi^{(+)}\rangle = E|\psi^{(+)}\rangle$$

אנו מניחים שהדבר אפשרי מכיון של H_0 ו- H_0+V ספקטרום אנרגיה רציף (בנוסף לכך ל- H_0+V יתכן אוסף בדיד של מצבים קשורים). בפרט נחפש $|\psi\rangle$ שיקיים $|\psi^{(+)}\rangle \to |\phi\rangle$ כאשר $V \to 0$.

המוטיבציה להצגת הבעיה בצורה זו הינה הבאה: $|\phi\rangle$ מתאר את החלקיק הפוגע. מכיון שכל מצב עצמי של H_0 הינו פרוס על כל המרחב (לדוגמא גל מישורי) זהו קירוב למצב בו חבילת הגלים הפוגעת רחבה מאוד ביחס לאורך הגל של דה-ברולי. במקרה שכזה ובתנאי שהמפזר קטן

בהרבה מרחק תחילת הגלם הרי שבזמן ההתנגשות, בסביבת המפזר, המצב של החלקיק הפוגע ניתן בקירוב ע"י גל חופשי. גל זה מפוזר תוך הנחה באופן אלסטי (למפזר אין דרגות חופש פנימיות) למצב חדש $|\psi\rangle$ אותו אנו מעוניינים למצוא.

נאיבית הפתרון ל(1) ניתן להצגה באופן סתמי כ:

$$|\psi^{(+)}\rangle = \frac{1}{E-H_0} V |\psi^{(+)}\rangle$$

כאשר $\frac{1}{E-H_0}$ האופרטור ההופכי ל $E-H_0$.
הבעיה עם הצגה זו היא ש $E-H_0$ יכול להתאפס ועלינו להגדיר כיצד לטפל בקוטב $\frac{1}{E-H_0}$. כפי שנראה בהמשך הדרך המתאימה לעשות זאת בהקשר בעית הפיזור היא להחליף את $\frac{1}{E-H_0}$ ב $\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}$ כאשר ε אינפיניטסימלי חיובי. בנוסף הפתרון שהצגנו מתאפס בגבול $V\to 0$ בניגוד לדרישה שבגבול זה יקיים $|\psi\rangle \to |\phi\rangle$. קל לראות שמכיוון ש $(E-H_0)|\phi\rangle = 0$ הפתרון המבוקש הינו

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} V |\psi^{(+)}\rangle$$

משוואה זו ידועה כמשוואת Lippmann-Schwinger.
נטיל את המשוואה על $\langle \vec{r}|$ כדי לקבל את המשוואה בהצגת המקום:

$$\psi^{(+)}(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + \int d^3r' d^3r'' \langle \vec{r}| \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} |\vec{r}\,'\rangle \langle \vec{r}\,'|V|\vec{r}\,''\rangle \langle \vec{r}\,''|\psi^{(+)}\rangle$$

$$= \phi(\vec{r}) + \int d^3r' \langle \vec{r}| \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} |\vec{r}\,'\rangle V(\vec{r}\,') \psi^{(+)}(\vec{r}\,')$$

כשהשתמשנו בעובדה ש $\hat{V}$ אלכסוני בהצגת המקום.
נהיה מעוניינים כעת לחשב את גרעין (kernel) המשוואה האינטגרלית הנ"ל הידוע בשם פונקצית גרין (Green's function). פונקציה מסוג זה המקבלת אופרטורים הופכיים של אופרטורים דיפרנציאליים ממלאת תפקיד מרכזי בפיסיקה תאורטית, בעיקר זו של מערכות רבות חלקיקים. הפונקציה המסוימת המופיעה אצלנו הינה דומה ל retarded Green's function מטעם שנבין בהמשך.

$$G(\vec r-\vec r\,')= \langle \vec r|\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}|r'\rangle$$

$$=\int d^3p\ \langle \vec r|\vec p\rangle \frac{1}{E-\frac{p^2}{2m}+i\varepsilon}\langle \vec p|\vec r\,'\rangle$$

$$=\int d^3p\ \frac{1}{E-\frac{p^2}{2m}+i\varepsilon}\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\ e^{i\frac{\vec p}{\hbar}(\vec r-\vec r\,')}$$

$$=\int_0^\infty dp\,p^2\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\int_0^{2\pi} d\varphi\ \frac{1}{E-\frac{p^2}{2m}+i\varepsilon}\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\ e^{i\frac{p}{\hbar}|\vec r-\vec r\,'|\cos\theta}$$

כשהצבנו את האינטגרל בקואורדינטות כדוריות כאשר θ היא הזווית בין $\vec p$ ל $\vec r-\vec r\,'$

$$=\frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty dp\ p^2\ \frac{1}{E-\frac{p^2}{2m}+i\varepsilon}\ \frac{e^{i\frac{p}{\hbar}|\vec r-\vec r\,'|}-e^{-i\frac{p}{\hbar}|\vec r-\vec r\,'|}}{i\frac{p}{\hbar}|\vec r-\vec r\,'|}$$

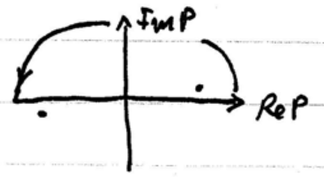
$$=\frac{-1}{(2\pi\hbar)^2}\ \frac{2m}{i|\vec r-\vec r\,'|}\int_{-\infty}^{\infty} dp\ \frac{p\,e^{i\frac{p}{\hbar}|\vec r-\vec r\,'|}}{p^2-2mE-i\varepsilon}$$

מכיון שסכום $2m\varepsilon$ הוא עדיין אינפיניטסימלי וחיובי ולכן כתבנו אותו שוב כ ε.

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\ \frac{2mi}{|\vec r-\vec r\,'|}\int_{-\infty}^{\infty} dp\ \frac{p\,e^{\frac{i}{\hbar}p|\vec r-\vec r\,'|}}{\left(p-\sqrt{2mE}-i\varepsilon\right)\left(p+\sqrt{2mE}+i\varepsilon\right)}$$

השתמשנו בעובדה שמכיון ש $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}>0$, $\sqrt{2mE}\,\varepsilon$ הוא אינפיניטסימלי וחיובי וניתן להחליפו ב ε
תחת תהליך הגבול $\varepsilon\to 0$ בו אנו מעוניינים. תהליך זה מצדיק גם את ההתעלמות מאבר ε^2
שנופל במכנה מכיון שהוא נוצר ביחס ל $i\varepsilon$ ובנוסף ל p^2-2mE (פרט למקרה $p^2=2mE$ אבל
בו המכנה נשלט ע"י $i\varepsilon$ ונוכחות ε^2 לא משנה בגבול $\varepsilon\to 0$)

נחשב את האינטגרל בעזרת משפט השארית כשנסגור את מסלול האינטגרציה באינסוף בחצי המישור



העליון : $p\to i\infty$ בו המונה שואף אקספוננציאלית לאפס:

התרומה באה רק מהקוטב ב $p=\sqrt{2mE}+i\epsilon$

$$G(\vec r-\vec r')=\frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\frac{2mi}{|\vec r-\vec r'|}\cdot 2\pi i\,\frac{\sqrt{2mE}\,e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}\,|\vec r-\vec r'|}}{2\sqrt{2mE}}$$

$$=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{ik|\vec r-\vec r'|}}{4\pi|\vec r-\vec r'|}$$

נשתמש ב: $\sqrt{2mE}=\sqrt{2m\frac{\hbar^2k^2}{2m}}=\hbar k$

נציב את התוצאה במשוואת Lippmann-Schwinger לקבל

$$\psi^{(+)}(\vec r)=\underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec k\cdot\vec r}}_{|\phi\rangle=|\vec k\rangle}-\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3r'\,\frac{e^{ik|\vec r-\vec r'|}}{4\pi|\vec r-\vec r'|}\,V(\vec r')\,\psi^{(+)}(\vec r')$$

כשהנחנו שפונקצית הגל של החלקיק הפוגע הינה גל חופשי. התוצאה שקיבלנו ניתנת לפרשנות ברורה!
האיבר הראשון מתאר את החלקיק הפוגע והאיבר השני הינו גל כדורי הנובע מאיזור הפיזור בו $V\neq0$
ומתקדם החוצה לכוון אינסוף. נשים לב שאם היינו בוחרים לטפל בקוטב באופן $\frac{1}{E-H_0-i\epsilon}$
האיבר השני היה מתאר גל כדורי המתכנס מאינסוף לכוון הפוטנציאל המפזר
מתואר $e^{-ik|\vec r-\vec r'|}$ בניגוד למקרה מרחוק בעבר. Advanced Greens function
באופן כללי Retarded Green's functions מתארים תהליכים קוזליים (causal).

בניסוי פיזור הגלאי ממוקם במרחק רב מהפיזור באופן ש $|\vec r|\gg a$ כאשר a הינו גודל האזור
בו מתרחש הפיזור. מכיון שהאינטגרציה על $\vec r'$ מתרחשת באזור הפיזור $V\neq0$ נקבל $|\vec r|\gg|\vec r'|$
ונוכל לכתוב

$$|\vec r-\vec r'|\simeq\sqrt{r^2-2\vec r\cdot\vec r'}\simeq r-\frac{\vec r\cdot\vec r'}{r}$$

: $r\equiv|\vec r|$

ונוכל לרשום

$$\psi^{(+)}(\vec{r}) \simeq \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}')\psi^{(+)}(\vec{r}')$$

כאשר $\vec{k}' = k\frac{\vec{r}}{r}$ וקטור הגל של הגל המפוזר. שימו לב ש $|\vec{k}'| = k$ כנדרש מפיזור אלסטי. ניתן לרשום משוואה זו בצורה

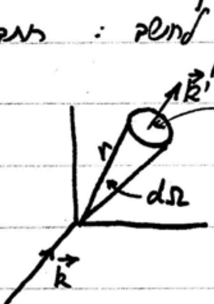
$$\psi^{(+)}(\vec{r}) \simeq \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k},\vec{k}')\frac{e^{ikr}}{r}\right]$$

$$f(\vec{k},\vec{k}') = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\langle \vec{k}'|V|\psi^{(+)}\rangle$$

$\langle \vec{k}|\vec{k}'\rangle = \delta^3(\vec{k}-\vec{k}')$, $\int d^3k\, |\vec{k}\rangle\langle\vec{k}| = 1$

כאשר $|\vec{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

יש להבין של $f(\vec{k},\vec{k}')$ מימד של אורך. כפי שנראה מיד f מגדירה את הגודל המרכזי אותו אנו מעוניינים לחשב: חתך הפיזור הדיפרנציאלי $\frac{d\sigma}{d\Omega}$:



שטף החלקיקים המפוזרים לתוך זווית מרחבית $d\Omega$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{\text{מספר החלקיקים המפוזרים לתוך זווית מרחבית } d\Omega \text{ ליחידת זמן}}{\text{שטף החלקיקים הפוגעים:}}$$

מס' החלקיקים הפוגעים החוצים יחידת שטח ליחידת זמן

נזכור ששטף = צפיפות × מהירות. מכיון שהמהירות $v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar k'}{m}$ שווה לחלקיקים הפוגעים והמפוזרים (פיזור אלסטי)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{r^2 d\Omega \times \text{צפיפות הגל המפוזר}}{1 \times \text{צפיפות הגל הפוגע}}$$

$$= r^2 d\Omega \cdot \frac{|f(\vec{k},\vec{k}')|^2}{r^2}$$

$$\Leftarrow \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k},\vec{k}')|^2$$

והוא בעל מימדים של שטח.

הפתרון שאינו תלוי בזמן שמשמש לבעית הפיזור מכיל בו-זמנית את הגל הפוגע ואת הגל המפוזר ושניהם ממלאים את המרחב כולו. כתוצאה מכך לא מובן הקשר בינו לבין האופן האינטואיטיבי בו אנו חושבים על תהליך פיזור בו חלקיק בעל תנע מוגדר פוגע במפזר וכתוצאה מכך משנה את כוון התנע שלו (אם לא את גודלו בהתנגשות אלסטית) או ממשיך בכוון תנועתו המקורי. למעשה הפתרון הנ"ל מכיל תמונה זו בתנאי שנשתמש בו לתאור חבילת גלים המתפזרת. נראה כיצד.

נתבונן בחבילת גלים גאוסית המרוכזת ב $t=0$ סביב הראשית עם תנע ממוצע $\hbar\vec{k}$:

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{W^2}{2\pi^3}\right)^{3/4}\int d\vec{q}\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{-W^2(\vec{q}-\vec{k})^2} = \frac{1}{(2\pi W^2)^{3/4}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-\frac{r^2}{4W^2}}$$

קל לראות כי $|\psi|^2$ מרוכזת סביב הראשית עם רוחב (סטית תקן) W וכי היא מורכבת מגלים סביב $\vec{k}$ כשרוחב ההתפלגות $\Delta k = \frac{1}{2W}$ כנדרש מעקרון אי-הודאות.

מכיון שכל גל מישורי הינו מצב עצמי של H_0 ההתפתחות בזמן של חבילת הגלים במקרה החופשי ניתנת לחישוב מיידי: כל מרכיב צובר פאזה $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$:

$$\psi(\vec{r},t) = \left(\frac{W^2}{2\pi^3}\right)^{3/4}\int d\vec{q}\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2 q^2}{2m}t} e^{-W^2(\vec{q}-\vec{k})^2}$$

$$= \left(\frac{W^2}{2\pi^3}\right)^{3/4}\left(\frac{\pi}{W^2+\frac{i\hbar}{2m}t}\right)^{3/2} e^{-\left[\frac{r^2-4iW^2\vec{k}\cdot\vec{r}-4k^2W^4}{4\left(W^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right)}+k^2W^2\right]}$$

קל יותר להבין ביטוי זה אם נתבונן בצפיפות ההסתברות

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \frac{1}{\left[2\pi W(t)^2\right]^{3/2}} e^{-\frac{\left(\vec{r}-\frac{\hbar\vec{k}}{m}t\right)^2}{2W(t)^2}}$$

$$W(t) = \left[W^2+\left(\frac{\hbar t}{2mW}\right)^2\right]^{1/2} = W\left[1+\left(\frac{\hbar t}{2mW^2}\right)^2\right]^{1/2}$$

כלומר חבילת הגלים מתקדמת במהירות $\frac{\hbar\vec{k}}{m}$ ומרכזה לאחר זמן t יהיה ב $\vec{r}=\frac{\hbar\vec{k}}{m}t$ כצפוי.
במהלך התנועה, בגלל יחס הנפיצה הלא לינארי $E=\frac{\hbar^2k^2}{2M}$, חבילת הגלים מתרחבת בהתאם ל $W(t)$.

כל עוד $t \ll \frac{mW^2}{\hbar}$ אפקט הנפיצה על רוחב חבילת הגלים זניח. במקרה זה נעבור לביטוי ל $\Psi(\vec{r},t)$:

$$\Psi(\vec{r},t)=\left(\frac{W^2}{2\pi^3}\right)^{3/4}\int d\vec{q}\, e^{i(\vec{q}+\vec{k})\vec{r}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{q}+\vec{k})^2t}\, e^{-W^2q^2}$$

את הביטוי המופיע באינטגרנד נוכל לקרב
מכיוון שהגאוסיאן מקבל $q\sim\frac{1}{W}$; $\frac{\hbar t}{mW^2}\ll 1$

$$\frac{\hbar}{2m}\left(k^2+2\vec{k}\vec{q}+q^2\right)t \simeq \frac{\hbar}{2m}\left(k^2+2\vec{k}\vec{q}\right)$$

במקרה זה נקבל

$$\Psi(\vec{r},t)=\frac{1}{(2\pi W^2)^{3/4}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2k^2}{2m}t}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, e^{-\frac{\left(\vec{r}-\frac{\hbar\vec{k}}{m}t\right)^2}{4W^2}}$$

נתבונן כעת במקרה הכולל את הפוטנציאל המפזר ונבנה את חבילת הגלים מפתרונות הפיזור שמצאנו. מכיוון שכל מרכיב $\vec{k}$ הוא עדיין בעל אנרגיה $\frac{\hbar^2k^2}{2M}$ (רק בנינו את מצב הפיזור המתאים ל $\vec{k}$) נקבל במקרה זה

$$\Psi^{(+)}(\vec{r},t)=\left(\frac{W^2}{2\pi^3}\right)^{3/4}\int d\vec{q}\left[e^{i\vec{q}\vec{r}}+f(\vec{q},\vec{q}')\frac{e^{iqr}}{r}\right]e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2q^2}{2m}t}\, e^{-(\vec{q}-\vec{k})^2W^2}$$

נניח שגם ש $|t|\ll\frac{mW^2}{\hbar}$ כך שרוחב החבילה לא משתנה משמעותית. בנוסף נרצה להבין את המפזר בזמן בו חבילת הגלים כולה עברה או עדיין לא הגיעה לאזור הפיזור שגודלו נניח $a\ll W$ כדי שכולו יורגש על ידי החבילה. מכיוון שסיימנו שמרכז החבילה נמצא ב $r=\frac{\hbar k}{m}t$ התנאי האחרון יתמלא אם $|t|\gg\frac{mW}{\hbar k}$. שני התנאים יכולים להתקיים במקביל אם $Wk\gg 1 \Rightarrow k\gg\frac{1}{W}$ כלומר אם התנע הממוצע של החבילה גדול ביחס לרוחב התנע שלה.
זהו המצב המתאים לחלקיק בעל תנע מוגדר היטב.

החלק הראשון באינטגרל מתאר חבילת גל המתקדמת באופן חופשי לאורך $\vec{r} = \frac{\hbar \vec{k}}{m} t$.
נתמקד לכן בחלק השני אותו נכתוב כ:

$$\left(\frac{W^2}{2\pi^3}\right)^{3/4} \int d\vec{q}\, f\left(\vec{q}+\vec{k}, |\vec{q}+\vec{k}| \frac{\vec{r}}{r}\right) \frac{e^{i|\vec{q}+\vec{k}|r}}{r}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{q}+\vec{k})^2 t}\, e^{-W^2 q^2}$$

נשתמש בקירוב שערכנו קודם לכן באיבר הפאזה הדינמית ובעובדה שמכיון ש $q \sim \frac{1}{W} \ll k$ נוכל לקרב

$$|\vec{q}+\vec{k}| \simeq \sqrt{k^2 + 2\vec{k}\cdot\vec{q}} \simeq k + \frac{\vec{k}\vec{q}}{k}$$

$$\simeq \left(\frac{W^2}{2\pi^3}\right)^{3/4} \int d\vec{q}\, f(\vec{k}, \vec{k}')\, \frac{e^{ik\cdot r}}{r}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t}\, e^{i\frac{\vec{k}\cdot\vec{q}}{k}\left(r - \frac{\hbar k}{m}t\right)}\, e^{-W^2 q^2}$$

$$= \frac{1}{(2\pi W^2)^{3/4}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t} f(\vec{k}, \vec{k}')\, \frac{e^{ikr}}{r}\, e^{-\frac{\left(r - \frac{\hbar k}{m}t\right)^2}{4W^2}}$$

חלק זה מתאר לכן גל כדורי בעל פרופיל גאוסי המתפשט מהראשית (אזור הפיזור) במהירות $\frac{\hbar k}{m}$. שימו לב כי מכיון ש $r>0$ האקספוננט האחרון גורם לדעיכה חזקה של הגל עבור $t<0$. תוצאה זו שעבדה לכן רק עבור $t>0$ מתארת גל מתפשט המרוכז סביב $r = \frac{\hbar k}{m} t$. קיבלנו לכן שלפני ההתנגשות: $t<0$ בקירוב הגל מכיל רק את החלקיק הבודד בעוד אחרי ההתנגשות $t>0$ (כי) המערכת מכילה הגלים הממשיך לנוע בכיוון המקורי וגל כדורי המתפשט מאזור ההתנגשות. שימו לב ששני הרכיבים מתאבכים עבור $\vec{r} \simeq \frac{\hbar \vec{k}}{m} t$. התאבכות זו חשובה כדי להבטיח את שימור ההסתברות: מכיון ששטף ההסתברות הנישא על ידי רכיב הגל הגלום לא משתנה לאחר הפיזור ומכיון שנוסף לו לאחר הפיזור רכיב הגל הכדורי המפוזר הנושא איתו שטף הסתברות ברור שכדי להבטיח שימור כולל של ההסתברות יש צורך בהתאבכות הורסת בין שני הרכיבים בכיוון התקדמות הגל המקורי! כפי שנראה כעת הדרישה לשימור ההסתברות מובילה לקשר בין אמפליטודת הגל המפוזר בכיוון הקדמי וחתך הפעולה הכללי:

<u>המשפט האופטי</u>:
$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\, \mathrm{Im}\, f(\theta=0)$$

כאשר $f(\theta=0)\equiv f(\vec{k},\vec{k})$ אמפליטודת הפיזור בכוון הקדמי ! $\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$ חתך הפיזור הכולל.

<u>הוכחה</u>:

נשתמש במשוואת Lippmann-Schwinger
$$|k\rangle = \left(1 - \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} V\right)|\psi^{(+)}\rangle$$

ובהגדרת f:
$$f(\vec{k},\vec{k}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\langle \vec{k}|V|\psi^{(+)}\rangle$$

נקבל
$$\mathrm{Im}\, f(\theta=0) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\langle\psi^{(+)}|\left(1-V\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}\right)V|\psi^{(+)}\rangle\right\}$$

נשתמש ב: $\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{E-H_0}\right)+i\pi\,\delta(E-H_0)$ ובהרמיטיות V ! $VP\left(\frac{1}{E-H_0}\right)V$ נקבל

$$= \frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^3}{4}\langle\psi^{(+)}|V\delta(E-H_0)V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^3}{4}\int d^3k'\,d^3k''\,\langle\psi^{+}|V|\vec{k}'\rangle\langle\vec{k}'|\delta(E-H_0)|\vec{k}''\rangle\langle\vec{k}''|V|\psi^{(+)}\rangle$$

נשתמש ב:
$$\langle\vec{k}'|\delta(E-H_0)|\vec{k}''\rangle = \delta(\vec{k}'-\vec{k}'')\,\delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2-\frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right) = \frac{m}{\hbar^2 k}\delta(k-k')\,\delta(\vec{k}'-\vec{k}'')$$

וב $d^3k' = d\Omega' k'^2 dk'$ נקבל

$$= \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^2\frac{(2\pi)^3}{8}\cdot k\int d\Omega'\,\langle\psi^{(+)}|V|\vec{k}'\rangle\langle\vec{k}'|V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{8}\cdot k\cdot\frac{(4\pi)^2}{(2\pi)^6}\int d\Omega'\,\left|f(\vec{k},\vec{k}')\right|^2$$

$$= \frac{k}{4\pi}\sigma$$

קיבלנו לכן שבדרך כלל $f(\vec{k},\vec{k})$ <u>אינה</u> יכולה להיות ממשית.

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} V|\psi^{(+)}\rangle$$

משוואת Lippmann-Schwinger
היא משוואה סתומה לפתרון הפיזור $|\psi^{(+)}\rangle$
הפתרון האיטרטיבי שלה הינו

$$(1)\quad |\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} V|\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} V \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} V|\phi\rangle + \cdots$$

ובמרחב המקום

$$\psi^{(+)}(\vec r) = \phi(\vec r) + \int d\vec r\,' G(\vec r-\vec r\,')V(\vec r\,')\phi(\vec r\,') + \int d\vec r\,' d\vec r\,'' G(\vec r-\vec r\,')V(\vec r\,')G(\vec r\,'-\vec r\,'')V(\vec r\,'')\phi(\vec r\,'') + \cdots$$

באופן זה נקבל ה Born expansion. המובן הפיזיקלי שלו ברור. האיבר הראשון מתאר גל שאינו מפוזר. האיבר השני מתאר תהליך בו הגל הנכנס מתפזר בנקודה בפוטנציאל ומתקדם משם אל נקודת התצפית על ידי הפרופגטור $G(\vec r,\vec r\,') = \langle \vec r|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\vec r\,'\rangle$ (propogator).
האיבר השלישי מתאר תהליך בו הגל מתפזר מנקודה בפוטנציאל מתקדם משם מתפזר מנקודה אחרת בפוטנציאל ואז מתקדם לנקודת התצפית. האיבר ה n מתאר לכן תהליך בו הגל מתפזר $n-1$ פעמים לפני הגעתו לנקודת התצפית $\vec r$.

בפיזור נהוג גם להגדיר את אופרטור המעבר - transition operator (T-matrix) באופן הבא:

$$V|\psi^{(+)}\rangle = T|\phi\rangle$$

מהכפלת (1) ב V נקבל

$$T = V + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V + \cdots$$

כשהשתמשנו בעובדה ש$|\phi\rangle$ הינו מצב כללי מסוג גל מישורי הפורשים את מרחב הילברט.
מתוך הגדרת f נקבל

$$f(\vec k,\vec k') = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\langle \vec k'|V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{(2\pi)^3}{4\pi}\langle \vec k'|T|\vec k\rangle$$

T מתאר לכן את המעבר מ $|\vec k\rangle$ ל $|\vec k'\rangle$.

בקרוב <u>Born</u> (מסדר ראשון) מקרבים את הטור האינסופי לT על ידי האיבר הראשון $T=V$.
בקרוב זה

$$f^{(1)}(\vec{k},\vec{k}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3r\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}}\, V(\vec{r})$$

אמפליטודת הפיזור נתונה עד כדי קבוע על ידי טרנספורם פוריה של הפוטנציאל המפזר. דהינו, בניסוי זה מדגים את עקרון אי-הוודאות: כדי ללמוד פרטים על מבנה הפוטנציאל המפזר בסקלות קטנות יש לבצע ניסוי פיזור עם מעבר תנע momentum transfer $\vec{q}=\vec{k}-\vec{k}'$ גבוה.

עבור פוטנציאל כדורי:

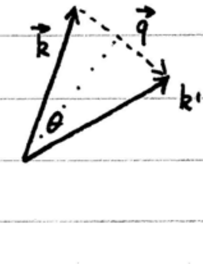
$$(1)\quad f^{(1)}(\vec{k},\vec{k}') = f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{2\pi} d\varphi\int_{-1}^{1} d\cos\tilde{\theta}\int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{iqr\cos\tilde{\theta}}\, V(r)$$

$$= -\frac{m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr\, r^2\, \frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{iqr}\, V(r)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^{\infty} dr\, r\, V(r)\sin(qr)$$

כאשר θ זווית הפיזור בין $\vec{k}$ ו $\vec{k}'$

$$q = |\vec{k}-\vec{k}'| = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$



פיזור <u>Rutherford</u>

ניסוי הפיזור הידוע ביותר, אולי, הוא של Rutherford בו נמדד פיזור חלקיקי α על רדיד זהב שגילה את קיומו של גרעין חיובי קטן בתוך האטום. נפעיל לכן את קירוב Born על פוטנציאל קולומבי נקודתי $V(r)=\frac{ZZ'e^2}{r}$ כאשר Ze מטען המפזר (גרעין זהב לדוגמא) ו Ze' מטען החלקיק הפוגע (לדוגמא חלקיק α). הצבה ב (1) מובילה לאינטגרל שאינו מתכנס.
נתחיל לכן בפוטנציאל Yukawa:

$$V(r) = V_0\,\frac{e^{-\mu r}}{r}$$

פוטנציאל הכוח החזק האחראי לקשירת פרוטונים ונייטרונים בגרעין ניתן לקרוב בעזרת פוטנציאל מסוג זה. הפוטנציאל הקולומבי מתקבל בגבול $\mu \to 0$ (טווח הפוטנציאל $1/\mu \to \infty$).
שימוש במשוואה (1) עבור פוטנציאל Yukawa נותן

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{q^2+\mu^2}$$

ולכן

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{\left[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2\right]^2}$$

ומכאן הפיזור הכללי הינו

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2 \frac{4\pi}{4k^2\mu^2+\mu^4}$$

בגבול $\mu \to 0$ ועבור $V_0 = ZZ'e^2$ נקבל

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mZZ'e^2}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{\left[2k^2(1-\cos\theta)\right]^2}$$

$$= \frac{1}{16}\left(\frac{2m}{\hbar^2 k^2}\right)^2 (ZZ'e^2)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

$$= \frac{1}{16}\left(\frac{ZZ'e^2}{E_K}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

כאשר $E_K = \frac{P^2}{2m}$ האנרגיה הקינטית של החלקיק הפוגע. זהו בדיוק התוצאה הקלאסית לפיזור מחלקיק נקודתי טעון שחושב ע"י רתרפורד. הזהות התוצאה הקלאסית עם התוצאה הקוונטית בקירוב Born הינה צרוף מקרים שאפשר את הצלחה לפרש מחדש את תוצאות נסויו ההסטורי של רתרפורד.

נשים לב לעובדות הבאות:

א. $f^{(1)}$ תלוי ב k וב θ רק דרך הצירוף $2k^2(1-\cos\theta) = 4k^2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$. הדבר נכון לכל פוטנציאל כדורי.

ב. $f^{(1)}$ ממשית. מהמשפט האופטי אנו יודעים כי אילו אם כן $\sigma=0$ (והמצב אינו כזה כאן) $\mathrm{Im}\, f(0)\neq 0$. מטבע הדברים סדרים גבוהים יותר בקירוב Born ידאגו לקיומו של המשפט.

ג. בקירוב Born הראשון $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ אינו תלוי בסימנו של הפוטנציאל המפזר (משיכה או דחיה).

3. בגבול $\mu\to 0$ חתך הפעולה הכולל σ עבור פוטנציאל קולומבי נקודתי מתבדר. ההתבדרות נובעת מכך שעבור $\mu\to 0$ $\frac{d\sigma}{d\Omega}\propto\frac{1}{\theta^4}$ עבור θ קטנה. במילים אחרות ההתבדרות מתרחשת מכיון שעבור $q\to 0$ טרנספורם פורייה של הפוטנציאל הקולומבי מתבדר. זהו ביטוי לאופיו ארוך הטווח של הכח החשמלי. לא משנה כמה רחוק החלקיק הנוגע מהמפזר הוא תמיד ירגיש ממנו - החלקיק הנוגע לא ניתן לתאור כגל חופשי גם אם הוא רחוק מאד מהמפזר. במקום גלים חופשיים יש להשתמש ב Coulomb wave functions שהם פתרונות רצף (לא קשורים) של משוואת שרדינגר בנוכחות הפוטנציאל הקולומבי. למרבה המזל חתך הפעולה הדיפרנציאלי המחושב בדרך זו מזדהה עם התוצאה הקלאסית המתקבלת כמו שראינו גם מקירוב Born הראשון. ראו Sakurai לשם הרחבה.

עד כה הנחנו פיזור מחלקיק נקודתי. כבר בניסוי המקורי של Rutherford התגלו סטיות מנוסחת הפיזור של חלקיק נקודתי בערכי q (momentum transfer) גבוהים. נבחן לכן פיזור מהתפלגות מטען $\rho(\vec{r})$ עבורה

$$V(\vec{r}) = \int d\vec{r}\,'\ \frac{Z'e^2}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\,\rho(\vec{r}\,')$$

מכיון ש $V(\vec{r})$ הינה קונבולוציה של צפיפות המטען ושל פוטנציאל מטען נקודתי ומכיון שאמפליטודת הפיזור בקירוב בורן הראשון הינה פשוט טרנספורם פורייה של הפוטנציאל המפזר נקבל (כשנזכר שטרנספורם פורייה של קונבולוציה הוא מכפלת הטרנספורמים)

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{Z'e^2}{q^2}\int d\vec{r}\,\rho(\vec{r})\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = f_{point\text{-}like}(\theta)\,F(q)$$

כאשר

$$f_{point\text{-}like}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{ZZ'e^2}{q^2}$$

אמפליטודת הפיזור של מטען נקודתי!

$$F(q) = \frac{1}{Z}\int d\vec{r}\,\rho(\vec{r})e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

הנו גורם המבנה (form - factor) התלוי בהתפלגות המטען ומנורמל $F(0)=1$.

חתך הפיזור הדיפרנציאלי יהיה לכן

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega}\bigg|_{point\text{-}like}|F(\vec{q})|^2$$

ניסויים מאוחרים יותר של פיזור אלקטרונים מגרעינים מצאו התנהגות תנודתית של חתך הפיזור הדיפרנציאלי על רקע דעיכה מונוטונית כפונקציה של q. ניתן להבין איכותית התנהגות שכזו אם נבחן את גורם המבנה של התפלגות מטען קבועה אחידה ρ_0 בכדור ברדיוס a כך ש $Z=\frac{4}{3}\pi a^3\rho_0 e$

$$F(q) = \frac{1}{Z}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-1}^{1}d\cos\theta\int_0^a dr\,r^2\rho_0 e^{iqr\cos\theta}$$

$$= \frac{4\pi\rho_0}{Zq}\int_0^a dr\,r\sin qr$$

$$= 3\,\frac{\sin(qa)-qa\cos(qa)}{(qa)^3}$$

קל לראות כי $F(q)$ מתנדנד כתוצאה מהתנהגות המונה. עבור qa גדול הוא דועך כ $\frac{1}{q^2}$ ומתאפס בקירוב כאשר $qa=\frac{\pi}{2}+\pi\cdot n$. התאמות מפורטות יותר של חתך הפיזור הדיפרנציאלי גילו כי צפיפות המסה בגרעין מפולגת באופן פחות או יותר אחיד בכדור אך יורדת לאפס באופן הדרגתי על שפתו (ולא חד כפי שהנחנו לעיל). רדיוס הגרעין מתנהג באופן מקורב כ $1.12\,fm\times A^{1/3}$ כאשר $A=Z+N$ מספר המסה (הפרוטונים והניטרונים) $1\,fm=10^{-15}\,m$! קטן ב 10^4-10^5 יותר מרדיוס האטום.

בתחילת שנות ה 70 של המאה הקודמת נסויי פיזור באנרגיות גבוהות של אלקטרון-פרוטון מצאו $F(q)\simeq\frac{1}{[1+(qa_p)^2]^2}$ כאשר $a_p\simeq 0.26\,fm$ קל לבדוק כי התנהגות כזו מקורה בדעיכת מטען [illegible]

פרופיל אקספוננציאלי $\rho(r) \propto e^{-\frac{r}{a_p}}$. היתה זו אחת העדויות הראשונות לכך שהפרוטון הוא למעשה חלקיק מורכב.

בעזרת קירוב הבורן ניתן גם לבדוק את השפעת האלקטרונים באטום על פיזור Rutherford. נבחר לעסוק בערכי q קטנים בהם הגרעין נראה כמטען נקודתי. האלקטרונים הנעים סביב הגרעין ממסכים את מטענו כך ש

$$V(\vec{r}) = \frac{ZZ'e^2}{r} - \int d\vec{r}' \frac{Z'e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \rho(\vec{r}')$$

כאשר $\rho(\vec{r})$ היא צפיפות ההסתברות של ענן האלקטרונים $\int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') = Z$. האיבר האלקטרוני הינו קונבולוציה של פוטנציאל נקודתי עם צפיפות הענן האלקטרוני ולכן $f(\theta)$ שהוא טרנספורם פורייה של הפוטנציאל שווה ל

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{ZZ'e^2}{q^2} \left[1 - \frac{1}{Z} \int d\vec{r}\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \rho(\vec{r})\right]$$

לדוגמא, עבור אטום המימן $Z=1$ במצב היסוד $\rho(\vec{r}) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}}$ כאשר $a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ רדיוס Bohr. עבורו $\int d\vec{r}\, e^{i\vec{q}\vec{r}} \rho(\vec{r}) = \frac{16}{(4+q^2a^2)^2}$ ובסך הכל

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} Z'e^2a^2 \frac{8+(qa)^2}{[4+(qa)^2]^2}$$

אנו רואים כי בגבול $q \to 0$ תרומת האלקטרונים מסירה את ההתבדרות ב $f(\theta)$ מכיון שבגבול זה בכל סקלת אורך גדולה האטום נראה כמו ניטרלי מבחינה חשמלית. לעומת זאת כאשר $q \gg a^{-1}$ ענן האלקטרונים לא משנה את חתך הפיזור השווה לערכו עבור הגרעין הנקודתי.
עבור חתך הפיזור הכולל נמצא

$$\sigma = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \pi \left(\frac{2m}{\hbar^2} Z'e^2a^2\right)^2 \left[\frac{1}{1+(ka)^2} + \frac{1}{(ka)^2} \ln\left[1+(ka)^2\right]\right]$$

בגבול $k \to 0$ נמצא

$$\sigma(k=0) = 2\pi\left(\frac{2m}{\hbar^2} Z' e^2 a^2\right)^2 = 8\pi Z'^2 \left(\frac{m}{m_e}\right)^2 a^2$$

תוצאה זו חשובה . שטח החתך האפקטיבי של האטום הינו מסדר גודל πa^2. מכיון ש $m \gg m_e$ חתך הפיזור גדול מהרבה משטח זה. כפי שנראה מיד הדבר מצביע על כשלון קרוב בורן - יש לקחת בחשבון סדרים גבוהים יותר ב T-matrix.

לעומת זאת בגבול של $k \gg a^{-1}$

$$\sigma(k \gg a^{-1}) = 8\pi Z'^2 \left(\frac{m}{m_e}\right)^2 a^2 \frac{\ln|ka|}{(ka)^2}$$

וקרוב בורן תקף.

ננסה להבין באילו תנאים קרוב Born מסדר ראשון תקף. בקרוב זה מחליפים את $\psi^+(\vec r')$ באינטגרל במשוואת Lippmann-Schwinger ב $\phi(\vec r')$. מכיון שהאינטגרל הוא על התחום בו הפוטנציאל המפזר $V(\vec r')$ משמעותי ברור שיש לדרוש $|\psi^+(\vec r')-\phi(\vec r')| \ll |\phi(\vec r')|$ בתחום האינטגרציה כדי שהקרוב יהיה מוצדק.
מתוך משוואת Lippmann-Schwinger אנו מקבלים שתנאי זה הינו

$$\left|\frac{2m}{\hbar^2}\int d\vec r' \, \frac{e^{ik|\vec r-\vec r'|}}{4\pi|\vec r-\vec r'|} V(\vec r') e^{i\vec k\vec r'}\right| \ll 1$$

בדרך כלל נדרוש את קיומו ב $\vec r=0$ שם הפוטנציאל המפזר מרוכז. אם נבחר $\vec k$ לאורך ציר z נקבל התנאי

$$\frac{2m}{\hbar^2}\left|\int d\vec r \, \frac{e^{ikr}}{4\pi r} V(\vec r) e^{ikz}\right| \ll 1$$

עבור פוטנציאל כדורי בעל טווח a ועומק אופייני V_0 נוכל להעריך את האינטגרל בגבולות הבאים:

עבור $k \ll a^{-1}$ נוכל להזניח הפאזות באינטגרל ונקבל את התנאי

$$\frac{m}{\hbar^2}|V_0| a^2 \ll 1$$

עבור $k \gg a^{-1}$ האקספוננטים באינטגרנד מתנודדים באופן חריף פרט לסביבת ציר z השלילי עליו $z=-r$. בסביבה זו $ikr+ikz \simeq ik\frac{x^2+y^2}{r}$. האינטגרל האפקטיבי על x ועל y נותן פקטור של $\frac{\pi r}{k}$ והאינטגרל על z ב $[-a,0]$ נותן a. התנאי עבור $k \gg a^{-1}$ הינו לכן

$$\frac{m}{\hbar^2}|V_0| \frac{a}{k} \ll 1$$

אנו רואים לכן שקל יותר למלא את תנאי התקפות ככל ש k גדול יותר. באופן כללי, קירוב בורן נעשה טוב יותר באנרגיות גבוהות. - זהו הגבול הסמי-קלאסי בו אפקטי התאבכות המתבטאים בסדרים גבוהים יותר קטנים.

לסיכום שים לב שבגבול $q \ll a^{-1}$

$$f^{(1)}(\theta) = \frac{-1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d\vec{r}\, V(\vec{r})\, e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$$\sim -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2} V_0 \frac{4}{3}\pi a^3$$

בגלל שאם $k \ll a^{-1}$ בהכרח $q \ll a^{-1}$ ומתוך התנאי שמצאנו לתקפות הקירוב בגבול זה נקבל שתנאי התקפות דורש

$$f^{(1)}(\theta) \ll a \quad \Rightarrow \quad \sigma = \int d\Omega\, |f(\theta)|^2 \ll \pi a^2$$

זו הסיבה שאין להאמין לתוצאה שמצאנו קודם לכן לפיזור Rutherford מאטום בגבול $k \to 0$. באופן כללי אם השימוש בקירוב Born מוביל לחתך פיזור הגדול מהשטח הגאומטרי של המפזר יש לחשוד בתוצאה.

קירוב Born מאפשר לנו לחשב את אמפליטודת הפיזור במקרים רבים אך, כפי שראינו, הוא נעשה מדויק באנרגיות גבוהות. שיטה חלופית המאפשרת להתגבר על בעיה זו ומתאימה לשימוש במקרה בו הפוטנציאל כדורי היא אנליזת גלים חלקיים (partial wave analysis). במקרה בו הפוטנציאל המפזר כדורי התנע הזוויתי נשמר ואנו נוכל לפתח את פונקציית הגל בפונקציות עצמיות של התנע הזוויתי. בגלל חוק השימור הפיזור לא מערב בין המרכיבים (הגלים החלקיים) בעלי תנע זוויתי שונה. נפתור לכן את הבעיה לכל רכיב בנפרד ונרכיב את התוצאות כדי לקבל את אמפליטודת הפיזור הכללית.

הפתרון למשוואת שרדינגר בנוכחות פוטנציאל כדורי ניתן לכתיבה כ

$$\psi(\vec{r}) = R(r)\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

כאשר $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ ה spherical harmonics.

הפונקציה הרדיאלית מקיימת

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R\right] + V(r)R = ER$$

בהעדר פוטנציאל: $V=0$ ולאחר שנגדיר $E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ו $\rho=kr$: המשוואה הופכת ל

$$\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}(\rho R)-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R+R=0$$

הפתרונות למשוואה זו הינן פונקציות בסל כדוריות (spherical Bessel functions). קיימים שני סוגים הנבדלים בהתנהגותם ליד הראשית: ננחש $R\propto\rho^n$ נציב במשוואה ונשמור את התרומה הקטנה ביותר של ρ לקבל $n(n+1)-l(l+1)=0$.

הפתרון המתנהג כמו ρ^l רגולרי בראשית ומסומן ב $j_l(\rho)$ ניתן להראות ש $j_l(\rho)\xrightarrow[\rho\gg l]{\rho\to\infty}\frac{\sin(\rho-l\frac{\pi}{2})}{\rho}$

הפתרון המתנהג כמו $\rho^{-(l+1)}$ סינגולרי בראשית ומסומן ב $n_l(\rho)$ $\quad n_l(\rho)\xrightarrow[\rho\gg l]{\rho\to\infty}-\frac{\cos(\rho-l\frac{\pi}{2})}{\rho}$

ניתן לבטא על ידי הצבה מפורשת במשוואה של $j_l(\rho)$ הצגה אינטגרלית מהצורה

$$j_l(\rho)=\frac{1}{2l!}\left(\frac{\rho}{2}\right)^l\int_{-1}^{1}dt\, e^{i\rho t}(1-t^2)^l$$

נבצע את ההצגה הנ"ל אינטגרציה בחלקים l פעמים ע"י אינטגרציה של האיבר $e^{i\rho t}$ וגזירה של $(1-t^2)^l$. בגלל הפקטור $(1-t^2)^l$ איבר השפה יעלם בכל פעם ונקבל

$$=\frac{1}{2l!}\left(\frac{\rho}{2}\right)^l\int_{-1}^{1}dt\,\frac{e^{i\rho t}}{(i\rho)^l}\left(-\frac{d}{dt}\right)^l(1-t^2)^l$$

נזכר שפולינומי Legendre מוגדרים בצורה $\quad P_n(t)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dt^n}(t^2-1)^n$

לקבל

$$j_l(\rho)=\frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{1}dt\, e^{i\rho t}P_l(t)$$

כלומר Legendre מהווים מערכת שלמה על הקטע $[-1,1]$ עד הנורמליזציה

$$\int_{-1}^{1} dt\, P_n(t)\, P_m(t) = \frac{2}{2n+1}\,\delta_{n,m}$$

ולכן הבסיס האורתונורמלי הינו $\frac{P_n(t)}{\sqrt{2/(2n+1)}}$ ומכאן

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(t) P_n(t') = \delta(t-t')$$

הכפלה של (1) ב $(2l+1)P_l(t')$ וסכום על l מביאה למסקנה ש

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l P_l(t)\, j_l(\rho) = e^{i\rho t}$$

אם נבחר $t=\cos\theta$ ונבחר ש $\rho=kr$ נקבל את הנוסחה העומדת בבסיס שיטת הגלים החלקיים:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l j_l(kr)\, P_l(\cos\theta)$$

ושימוש בהתנהגות האסימפטוטית של j_l נקבל:

$$\xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r}\right] P_l(\cos\theta)$$

כלומר הגל המישורי מורכב מגלים כדוריים המתכנסים אל הראשית ונובעים ממנה.
נשווה את ההתנהגות האסימפטוטית שמצאנו לפתרון הכללי ממשוואת Lippmann-Schwinger:

$$\psi^{(+)}(\vec r) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{ikz} + f(\vec k,\vec k')\frac{e^{ikr}}{r}\right]$$

כשהנחנו שהגל הבודד הינו לאורך ציר z: $\vec k = k\hat z$. מכאן ש $f(\vec k,\vec k')\propto\langle\vec k'|T|\vec k\rangle$ ומכיון שעבור פוטנציאל כדורי T אלכסוני בשl ו-m! ומכיון שהמצב הראשוני $|\vec k\rangle$ מכיל רק $Y_l^{m=0}$ נקבל שגם f נכתבת רק על ידי $Y_l^0 \propto P_l(\cos\theta)$:

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

האינפורמציה הפיזיקלית תמונה במקדמים המרוכבים $f_l(k)$. הפקטור $2l+1$ הינו לנוחות בלבד.

נוכל לכן לרשום את ההתנהגות האסימפטוטית של פתרון הפיזור באופן הבא:

$$\psi^{(+)}(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2ik} \left[[1+2ikf_l(k)] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right] P_l(\cos\theta)$$

מצורה זו השפעת המפזר ברורה: הוא משנה את מקדמי הפאזה של הגל הכדורי היוצא מהראשית באופן $1 \to 1+2ikf_l(k)$ בעוד שהגל המתכנס אל הראשית אינו מושפע כלל.

נהוג להגדיר

$$S_l(k) = 1+2ikf_l(k)$$

כאלמנט האלכסוני ה-l של אופרטור הפיזור S-matrix (מטריצת הפיזור).

תנאי שימור ההסתברות מטיל תנאי נוסף על אלמנטים אלה. מכיון שבבעיה שבחנו אין מקור לחלקיקים או בליעה שלהם, כמות השטף של החלקיקים הנכנס אל הראשית חייב להשתוות לשטף היוצא ממנה. מכיון שהתנע הזוויתי נשמר תנאי זה חייב להתקיים לכל גל חלקי בנפרד. במילים אחרות המקדם של הגל הנכנס $\frac{e^{-ikr}}{r}$ חייב להשתוות בגודלו לזה של הגל היוצא $\frac{e^{ikr}}{r}$ $\Leftarrow$

$$|S_l(k)| = 1$$

תנאי זה ידוע כתנאי האוניטריות. ניתן להראות כי הוא נובע מהגבלת המשפט האופטי על הפונקציה $f(\theta)$ במונחי הגלים החלקיים, כפי שנראה בשיעורי הבית. עובדה זו מדגימה שוב כי המשפט האופטי הינו ביטוי לשימור ההסתברות ובמילים אחרות לאוניטריות. נוכל לכן לרשום

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$$

$$\Rightarrow f_l = \frac{e^{2i\delta_l}-1}{2ik} = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l$$

קיבלנו לכן שהשינוי היחיד לפונקציית הגל במרחקים גדולים כתוצאה מהפיזור הינו שינוי בפאזה של הגל היוצא. כל האינפורמציה לגבי הפיזור נמצאת בהסטות הפאזה δ_l: phase shifts

במונחי ה phase shifts, אמפליטודת הפיזור נתונה ע"י

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell\,P_\ell(\cos\theta)$$

וחתך הפיזור הכללי

$$\sigma=\int d\Omega\,|f(\theta)|^2$$

$$=\frac{1}{k^2}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-1}^{1}d\cos\theta\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{\ell'=0}^{\infty}(2\ell+1)(2\ell'+1)\,e^{i(\delta_\ell-\delta_{\ell'})}\sin\delta_\ell\sin\delta_{\ell'}\,P_\ell(\cos\theta)P_{\ell'}(\cos\theta)$$

$$=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell$$

כשהשתמשנו בזהות האורתונורמליות של ה P_ℓ.

אנו רואים כי קיים ערך מקסימלי אפשרי לחתך הפיזור של כל גל חלקי: $\sigma^{(\ell)}_{max}=\frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)$ והוא מתקבל עבור phase shift $\delta_\ell=\pm\frac{\pi}{2}$. מקרה זה נקרא הגבול האוניטרי (unitary limit). גבול זה ניתן להבנה אינטואיטיבית מהשיקול הסמי-קלאסי הבא: נניח כי אנו משגרים חלקיק עם תנע p ו impact parameter b אל עבר המפזר. לחלקיק תנע זוויתי $L=pb$. קוונטיזציית התנע הזוויתי מקוונטת כך שבגבול הקלאסי $L=\hbar\ell$. נניח כי התנע הזוויתי של החלקיק נמצא בתחום $\hbar\ell<L<\hbar(\ell+1)$ כך שתוך שימוש ב $p=\hbar k$ נקבל $\frac{\ell}{k}<b<\frac{\ell+1}{k}$. האזור המתאים לכן סמי-קלאסית לגל החלקי ה ℓ היא הטבעת בעלת הרדיוס b בתחום זה. אם כל החלקיקים בתחום זה מתפזרים בהסתברות 1 חתך הפיזור הקלאסי יהיה שטח הטבעת $\pi\left(\frac{\ell+1}{k}\right)^2-\pi\left(\frac{\ell}{k}\right)^2=\frac{\pi}{k^2}(2\ell+1)$ המתאים עד כדי פקטור 4 לתוצאה שקיבלנו.

כיצד נוכל לחשב את הסטות הפאזה δ_ℓ עבור פוטנציאל נתון? נניח כי הפוטנציאל מתאפס עבור $r>R$. עבור $r>R$ פונקציית הגל חייבת להיות צ"ל של גל כדורי חופשי. מכיון שתחום זה אינו מכיל את הראשית n_ℓ הוא פתרון אפשרי ופונקציית הגל תהיה קומבינציה ליניארית של $j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)$ ו $n_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)$:

נוכל לכן לרשום עבור $r>R$

$$\psi^{(+)}(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^{l}e^{i\delta_l}\left[\cos\alpha_l\, j_l(kr)-\sin\alpha_l\, n_l(kr)\right]P_l(\cos\theta) \qquad (1)$$

כשדואגים שסכום ריבועי מקדמי הפונקציה יהיה 1 (עבור כל l) כדי לשמור על נרמול הפונקציה. נשתמש בהתנהגות האסימפטוטית של j_l ו-n_l למצוא

$$\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^{l}e^{i\delta_l}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\alpha_l\right)P_l(\cos\theta)$$

נשווה זאת להתנהגות האסימפטוטית של פתרון הבעיה בכתיב הגלים החלקיים:

$$\psi^{(+)}(\vec{r})\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{1}{2ik}\left[e^{2i\delta_l}\frac{e^{ikr}}{r}-\frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r}\right]P_l(\cos\theta)$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^{l}e^{i\delta_l}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)P_l(\cos\theta)$$

ונכיר לכן כי בפתרון (1) של $\delta_l=\alpha_l$. מכאן נסיק ש $-\tan\delta_l$ נתון על ידי יחס המקדמים של n_l ו j_l ב (1).

את ההתנהגות של הסדרה והאמצה של δ_l עבור k קטנים נוכל לקבל בדרך הבאה: לכל l הפונקציה הרדיאלית R_l ונגזרתה $\frac{dR_l}{dr}$ צריכות להיות רציפות ב r ולכן גם הנגזרת הלוגריתמית

$$\left.\frac{d\ln R_l}{d\ln r}\right|_{r=R}=\left.r\frac{\frac{dR_l}{dr}}{R_l}\right|_{r=R}$$

עבור $r=R+\varepsilon$ נקבל מ(1):

$$=kR\left.\frac{\cos\delta_l\frac{dj_l(kr)}{d(kr)}-\sin\delta_l\frac{dn_l(kr)}{d(kr)}}{\cos\delta_l\, j_l(kr)-\sin\delta_l\, n_l(kr)}\right|_{r=R}=kR\left.\frac{\frac{dj_l(kr)}{d(kr)}-\tan\delta_l\frac{dn_l(kr)}{d(kr)}}{j_l(kr)-\tan\delta_l\, n_l(kr)}\right|_{r=R} \qquad (2)$$

בתחום $r<R$ עלינו לפתור המשוואה

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_l)-\frac{l(l+1)}{r^2}R_l-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)R_l+k^2R_l=0$$

בגבול $kR\to0$ נוכל להזניח את האיבר האחרון ביחס לפוטנציאל ולמרכוז הצנטריפוגלי ולקבל פתרון שלא תלוי בk.

ולכן גם הנגזרת הלוגריתמית ב $r=R$ אותה נסמן ב β_l לא תלויה בk. מהשוואה ל(2) נסיק

עבור $kR\to0$:

$$\tan\delta_l=\left.\frac{kR\frac{dj_l(kr)}{d(kr)}-\beta_l j_l(kr)}{kR\frac{dn_l(kr)}{d(kr)}-\beta_l n_l(kr)}\right|_{r=R}$$

שימוש בהתנהגות של j ו-n עבור ארגומנט קטן מלמד אותנו ש

$\delta_\ell \to 0$ בגבול $k \to 0$ כמו

$$\delta_\ell \overset{k\to 0}{\propto} k^{2\ell+1}$$

התנהגות זו נקראת בשם threshold behavior

היא מבטאת את העובדה שהפונקציה הרדיאלית רואה בפוטנציאל אפקטיבי $V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ ולכן ככל ש-ℓ גדל המחסום הצנטריפוגלי גדל אף הוא ומונע מהחלקיק הנופל לחדור באופן משמעותי ולחוש בפוטנציאל המפזר בגבול של k ולכן גם $E \to 0$. כתוצאה מכך בגבול זה $\delta_\ell \to 0$ ומהר יותר עבור ℓ גדולים. מתוך התנהגות זו נקבל גם שתרומת ה partial wave ה-ℓ לחתך הפיזור הכללי מתנהגת כ

$$\frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \overset{k\to 0}{\propto} k^{4\ell}$$

ברור לכן כי בפיזור באנרגיות נמוכות חתך הפיזור נקבע בעיקרו על ידי $\ell=0$ S-wave scattering.

כדוגמה לבעיה הפשוטה של נתבונן בפיזור מכדור בלתי חדיר

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

ברור כי במקרה זה $\psi^{(+)}(\vec{r})$ צריכה להתאפס עבור $r=R$ ולכן

$$\cos\delta_\ell \, j_\ell(kR) - \sin\delta_\ell \, n_\ell(kR) = 0$$

$$\Rightarrow \tan\delta_\ell = \frac{j_\ell(kR)}{n_\ell(kR)}$$

עבור S-wave scattering

כשמשתמשים בביטויים המפורשים ל j_0 ו n_0

$$\tan\delta_0 = \frac{\sin(kR)/kR}{-\cos(kR)/kR} = -\tan kR$$

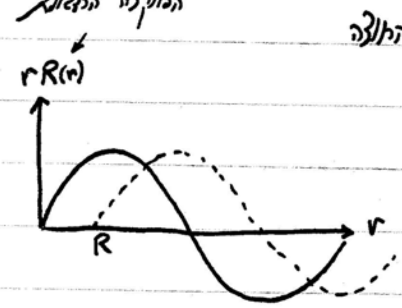
קיבלנו לכן עבור מקרה זה

$$\delta_0 = -kR$$

הרכיב $\ell=0$ בפונקציית הגל הרדיאלית הינו אם כן

$$\frac{\sin kr}{kr}\cos\delta_0 + \frac{\cos kr}{kr}\sin\delta_0 = \frac{1}{kr}\sin(kr+\delta_0) = \frac{1}{kr}\sin[k(r-R)]$$

התוצאה ברורה. מכיון שהחלקיק לא יכול לחדור לתחום $r<R$ הגל מוסט החוצה



חתך הפיזור של S-wave scattering

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2 kR$$

הינו מקסימלי עבור $k=0$: $\sigma_0 \xrightarrow{k\to 0} 4\pi R^2$

ערך זה גדול פי 4 משטח החתך הגאומטרי אך מאותו סדר גודל. בהקשר זה נהוג להגדיר גם את אורך הפיזור scattering length המוגדר כ:

$$a = -\lim_{k\to 0}\frac{d\delta_0}{dk}$$

אורך זה מגדיר את גודלו האפקטיבי של המפזר שכן בגבול $k\to 0$: $\sigma_0=4\pi a^2$.
באופן כללי $a>0$ עבור פוטנציאל דוחה. עובדה זו מתקבלת שבגבול $k\to 0$ $\delta_0=-ak<0$
כלומר הגל נדחה החוצה מהראשית כפי שראינו עבור פוטנציאל הכדור הקשיח.

נעבור להתבונן בגבול $kR\gg 1$ כן אנו מצפים להתנהגות הקרובה יותר להתנהגות הקלאסית עבורה חלקיקים עם impact parameter $b>R$ כלומר תנע זוויתי $L>pR$ אינם מתפזרים. ואכן בעזרת שימוש בהתנהגות האסימפטוטית של $j_l(\rho)$ ו $n_l(\rho)$ עבור $\rho\to\infty$ אם $\rho<l$ ניתן להראות שעבור $kR\gg 1$ ו $l>kR$ $\delta_l \sim e^{-2\sqrt{l^2-(kR)^2}}$.
כלומר רק גלים חלקיים עם $l<kR$ תורמים לחתך הפיזור. עבורם נקבל

$$\sin^2\delta_l = \frac{\tan^2\delta_l}{1+\tan^2\delta_l} = \frac{j_l^2(kR)}{j_l^2(kR)+n_l^2(kR)} \simeq \sin^2\left(kR - l\frac{\pi}{2}\right)$$

כשהשתמשנו בהתנהגות האסימפטוטית של $j_l(\rho)$ ו $n_l(\rho)$ עבור $\rho\to\infty$ ו $l<\rho$.
ניתן לראות כי בגבול זה δ_l משתנה ב 90° בכל פעם ש l גדל באחד. כתוצאה מכך אם נתבונן בזוג הסטות פאזה עוקבות נקבל

$$\sin^2\delta_l + \sin^2\delta_{l+1} = \sin^2\delta_l + \sin^2(\delta_l - \tfrac{\pi}{2}) = \sin^2\delta_l + \cos^2\delta_l = 1$$

מכיון שחתך הפיזור הכללי
מכל ערכי l רבים נוכל להחליף בקירוב זה
את $\sin^2\delta_l$ בערכו הממוצע $\frac{1}{2}$ ולקבל

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

$$\simeq \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)\cdot\frac{1}{2}$$

$$\simeq 2\pi R^2$$

תוצאה הכפולה מחתך הפיזור הקלאסי πR^2.
ניתן להבין תוצאה זו באופן הבא: היא מורכבת משתי תרומות. החלק הראשון נובע מפיזור גלים חופשיים ללא התאבכות בין הגלים והוא אנלוגי לפיזור הקלאסי של חלקיקים בעלי $L < PR$ ומקבל πR^2 לשטח החתך הכללי. החלק השני נובע מתרומות המתחברות באופן קוהרנטי מגלים חלקיים שונים לכלל אמפליטודה גדולה בכיוון הקדמי. חלק זה באמפליטודת הפיזור הכרחי כי לעבור התאבכות הורסת עם הגל הנוגע ולגרום לכך ש"בצל" מאחורי המפזר לא ימצאו חלקיקים. הוא תורם גם כן πR^2 לחתך הפיזור הכללי.

נפנה כעת לבחון פיזור מפוטנציאל מושך. נבדוק את התכונות הכלליות של בעיה זו מתוך הפתרון עבור פוטנציאל הבור הסופי

$$V = \begin{cases} -V_0 & r<R \\ 0 & r>R \end{cases}$$

נתבונן ברכיב $l=0$ עבורו משוואת הפונקציה הרדיאלית R_0 היא

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_0) + \left[k^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right](rR_0) = 0$$

נחפש פתרון המתאים כנדרש בראשית ובעל ההתנהגות האסימפטוטית $\sin(kr+\delta_0)$ מחוץ לפוטנציאל. קל לראות שהוא מהצורה:

$$rR_0(r) = \begin{cases} A\sin(\sqrt{k^2+K^2}\,r) & r<R \\ \sin(kr+\delta_0) & r>R \end{cases}$$

כשסימנו $K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ ו-A קבוע

הפונקציה rR_0 ונגזרתה צריכות להיות רציפות ב $r=R$. מתוך שוויון הנגזרת הלוגריתמית משני עברי $r=R$ נקבל משוואה שלא מערבת את A:

$$\frac{\frac{d}{dr}(rR_0)}{rR_0} = \sqrt{k^2+K^2}\cot\left(\sqrt{k^2+K^2}R\right) = k\cot(kR+\delta_0)$$

ומכאן

$$\delta_0 = \tan^{-1}\left[\frac{k}{\sqrt{k^2+K^2}}\tan\left(\sqrt{k^2+K^2}R\right)\right] - kR$$

וה scattering length

$$a = -\frac{d\delta_0}{dk}\Big|_{k=0} = R\left[1-\frac{\tan KR}{KR}\right]$$

אנו רואים שעבור K קטן (בור פוטנציאל רדוד) ה scattering length שלילי בניגוד למקרה של הפוטנציאל הדוחה. הדבר מובן מפני שהגל נמשך לתוך בור הפוטנציאל ולכן נראה התוצאה כמו במקרה הדוחה, כלומר $\delta_0>0$. ככל שהפוטנציאל נעשה מעמיק יותר (K גדל) ה scattering length גדל בערכו המוחלט עד שהוא נעשה אינסופי עבור $KR=\frac{\pi}{2}$.

כדי להבין את משמעות תוצאה זו נתבונן באלמנט מטריצת הפיזור בגל $l=0$:

$$S_0(k) = e^{2i\delta_0(k)} = e^{-2ikR}\,\frac{1+i\frac{k}{\sqrt{k^2+K^2}}\tan\left(\sqrt{k^2+K^2}R\right)}{1-i\frac{k}{\sqrt{k^2+K^2}}\tan\left(\sqrt{k^2+K^2}R\right)}$$

כפונקציה של k לאלמנט זה קוטב עבור $k=i\kappa$ דמיוני המקיים

$$(1)\quad \kappa = -\frac{\sqrt{K^2-\kappa^2}}{\tan\left(\sqrt{K^2-\kappa^2}R\right)}$$

ניתן להראות על ידי פתרון משוואת שרדינגר עבור בור הפוטנציאל שזהו בדיוק התנאי לקיומו של מצב קשור בבור עם אנרגיה $-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2M}$ הדועך מחוץ לבור כמו $e^{-\kappa r}$.
נניח כי אנו מתחילים עם בור עמוק (K גדול) לו מספר מצבים קשורים המתאימים למספר קטבים של S_0 על הציר המדומה החיובי. כשמקטינים את K אנרגיית המצבים הקשורים $-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2M}$ עולה: הקטבים על הציר המדומה החיובי נעים לעבר הראשית. כאשר $KR=\frac{\pi}{2}$

$\tan(KR)=\infty$ ולמשוואה (1) פתרון $\kappa=0$ המתאים למצב קשור עם $E=k=0$. זוהי בדיוק הנקודה בה מתאים שה scattering length מתבדר. התרחשות דומה תתקבל עבור $KR=(n+\frac{1}{2})\pi$ עבורם מצבים קשורים נוספים מתקבלים ב $k=0$. במילים אחרות, חתך הפיזור האינסופי עבור $k=0$ מתקבל כאשר קיים מצב קשור של הפוטנציאל המכבד בדיוק ב $k=0$. כאשר מקטינים את K מעבר לנקודות אלה המצב הקשור ב $k=0$ נעלם - הקוטב נע לצד המדומה השלילי. יחד עם זאת המצאות של הקוטב מיד מתחת לראשית גורמת לאמפליטודת הפיזור ב $\kappa\sim0$ להיות גדולה ולכן לחתך הפיזור באנרגיות נמוכות להיות גדול. דוגמה למרחש שתיארנו היא פיזור ניטרונים על גרעינים גדולים בו חתך הפיזור באנרגיות נמוכות יכול להיות גדול בהרבה סדרי גודל מגודלו הגאומטרי של הגרעין. זו הסיבה לכך שניטרונים איטיים יכולים להבלע באופן אפקטיבי על ידי גרעיני אורניום ולגרום לתגובת שרשרת.

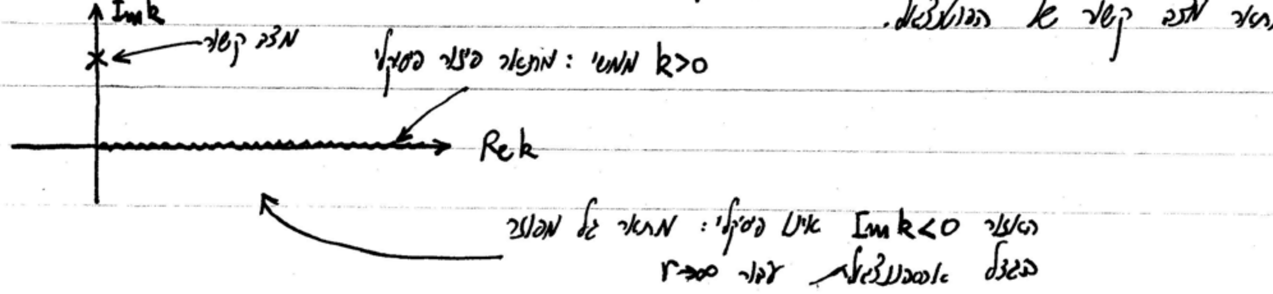
כדי להבין טוב יותר את הקשר בין מצבים קשורים של הפוטנציאל ובין קטבים של מטריצת הפיזור נשווה בין פתרון הפיזור עבור $l=0$ במרחקים גדולים:

$$\psi^{(+)} \propto S_0(k)\frac{e^{ikr}}{r}-\frac{e^{-ikr}}{r}$$

לבין ההתנהגות האסימפטוטית של המצב הקשור:

$$\frac{e^{-\kappa r}}{r}$$

ניתן לטעון כי $\frac{e^{-\kappa r}}{r}$ הוא כמו $\frac{e^{ikr}}{r}$ עבור $k=i\kappa$ דמיוני טהור אלא שגם אם נתבונן ב $\psi^{(+)}$ כפונקציה של k מרוכב הוא תמיד יכיל את האנלוג למצב הקשור בתוספת לחלק המתאר את הגל הנכנס. המקרה היחיד בו המצב אינו כזה הוא אם $S_0\to\infty$. מכיון ש $\psi^{(+)}$ חייב להיות מנורמל נהיה חייבים להכפילו במקדם נרמול קטן מאוד שיגרום לאמפליטודת הגל הנכנס להתאפס וישאיר את מקדם הגל המפוזר ל 1. במילים אחרות, אם $S_0\to\infty$ המערכת יכולה לקיים את הגל היוצא (עם k דמיוני) גם ללא נוכחות הגל הנכנס. מכיון שכך קוטב של $S_0(k)$ עבור k על הציר המדומה החיובי מתאר מצב קשור של הפוטנציאל.



נניח כעת כי הסינגולריות היחידה המשמעותית בתחום העניין שלנו הינה זו הקשורה למצב הקשור וננסה לבנות את התלות הפונקציונלית הכללית של $S_0(k)$ הממלאת אחר הדרישות הבאות:

1. קוטב ב $k=i\kappa$ (מצב קשור עם $E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$)
2. $|S_0|=1$ עבור $k>0$ ממשי (אוניטריות)
3. $S_0(k=0)=1$ (threshold behavior - נובע $\delta_0 \overset{k\to 0}{\propto} k$ ו $S_0=e^{2i\delta_0}$)

קל לראות ש
$$S_0(k) = -\frac{k+i\kappa}{k-i\kappa}$$
ממלאת אחר תנאים אלה. נשתמש בכך כדי לקבל

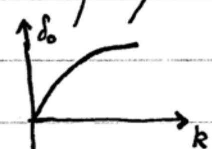
$$f_0 = \frac{S_0-1}{2ik} = \frac{1}{-\kappa-ik} = \frac{1}{k\cot\delta_0 - ik} \quad\Rightarrow\quad k\cot\delta_0 = -\kappa$$

אבל אנו יודעים מתוך ה threshold behavior ש $\delta_0 \overset{k\to 0}{=} -ak$ ולכן נוכל להסיק לבסוף את הקשר הבא בין המצב הקשור וה scattering length:

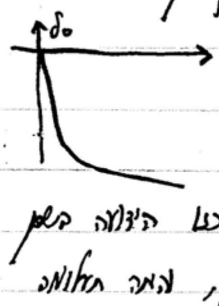
עבור $k\to 0$: $\kappa = \frac{1}{a}$

אנו מוצאים לכן ששימוש באנליטיות ובאוניטריות של $S_0(k)$ במישור המרוכב מאפשר לנו לקבל אינפורמציה על פתרונות משוואת שרדינגר (κ) מתוך מידע על מטריצת הפיזור (a). טכניקה מסוג זה יכולה להיות שימושית מאוד במקרים בהם פרטי הפוטנציאל המפזר אינם ידועים.

נסיים חלק זה של הדיון בכך שנשים לב שבעוד שעבור $KR<\frac{\pi}{2}$ התנהגות δ_0 ב k קטנים הינה מהצורה



הרי שעבור בור עמוק יותר $KR>\frac{\pi}{2}$ ההתנהגות הופכת ל



כלומר a הופך להיות חיובי. מעבר לכך $\delta_0=-\pi$ עבור ערך מסוים של k. באנרגיה זו $\sin\delta_0=0$ ולכן $\sigma_0=0$ למרות המשיכה החזקה של הפוטנציאל. התנהגות כזו הידועה בשם אפקט Ramsauer-Townsend אכן נצפתה בפיזור אלקטרונים על גזים כארגון, קריפטון וקסנון, והיתה תעלומה גדולה עד להופעת מכניקת הקוונטים.

ראינו כי פוטנציאל הבור הכדורי שניתחנו יכול להוביל לחתך פיזור גדול ליד ה threshold $(k\to 0)$ אם ל $\delta_0(k)$ קוטב הקרוב לראשית על הציר המדומה השלילי. קוטב כזה נובע ממצב קשור שנעלם - עלה מעל לסף הבור אך נוכחותו עדיין מורגשת. אם נעמיק מעט את הבור הוא ישוב ויופיע ב $k=0$. עולה השאלה - האם ניתן לקבל חתך פיזור גדול גם רחוק מה threshold כלומר באנרגיות גבוהות? נראה כי מצב כזה אכן. הוא מכונה Resonance וקשור להמצאות של קוטב מיד מתחת לציר הממשי בחצי ה"לא פיזיקלי". כדי להבין משמעות מצבים אלה נבחן שוב מקרה מסוים.

נתבונן בפיזור מפוטנציאל "delta shell" $(\gamma>0)$ $\quad V(r)=\gamma\,\delta(r-R)$

פוטנציאל שכזה היה קריקטורה של הפוטנציאל שממנו מתפזר חלקיק α מהגרעין. החלקיק צריך להתגבר על המחסום הקולומבי הגבוה אך אם הוא מתגבר עליו הוא יכול להלכד בתוך הגרעין כתוצאה מכוחות הגרעין המושך אותו ואחר כך לבצע tunneling החוצה דרך המחסום בתהליך של דעיכת α. נמצא עבור פוטנציאל זה את הסטת הפאזה עבור s-wave scattering.

כפי שראינו כבר במקרה של בור הפוטנציאל אנו מעוניינים בפתרון למשוואה הרדיאלית

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_0)+\left[k^2+\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\delta(r-R)\right](rR_0)=0$$

המקיים את ההתנהגות האסימפטוטית של גל סינוס מוסט מחוץ לפוטנציאל ומתאפס בראשית

$$rR_0=\begin{cases} A\sin kr & r<R \\ \sin(kr+\delta_0) & r>R \end{cases}$$

מתנאי רציפות פונקציית הגל ב $r=R$ נקבל

$$(1)\quad A\sin kR=\sin(kR+\delta_0)$$

אינטגרציה של משוואת שרדינגר בתחום $[R-\varepsilon,R+\varepsilon]$ מובילה לתנאי על הנגזרת:

$$\frac{d}{dr}(rR_0)\Big|_{R-\epsilon}^{R+\epsilon} = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}(rR_0)\Big|_{r=R}$$

$$(2)\qquad k\cos(kR+\delta_0) - Ak\cos(kR) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\sin kR$$

מהמשוואות (1) ו-(2) נקבל

$$\cot(kR+\delta_0) - \cot kR = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2 k}$$

$$\Rightarrow \frac{\sin\delta_0}{\cos\delta_0 - \cos(2kR+\delta_0)} = \frac{m\gamma}{\hbar^2 k}$$

ועוד קצת אלגברה תביא אותנו ל

$$e^{2i\delta_0} = \frac{1+\frac{2m\gamma}{\hbar^2 k}e^{-ikR}\sin kR}{1+\frac{2m\gamma}{\hbar^2 k}e^{ikR}\sin kR}$$

$$(3)\qquad = e^{-2ikR}\,\frac{\sin kR + \frac{\hbar^2 k}{2m\gamma}e^{ikR}}{\sin kR + \frac{\hbar^2 k}{2m\gamma}e^{-ikR}}$$

אנו רואים כי בגבול $\gamma\to\infty$ הקטבים של S_0 נמצאים ב $kR\to n\pi$. אלו הם המצבים הקשורים של הבור האינסופי הנוצר עבור $\gamma=\infty$. מאחר שידוע שהפתרון עבור בור הפוטנציאל המושך דורש שעבור k אלה $S_0\to\infty$ והמערכת יכולה לקיים את המצב הקשור גם ללא נוכחות של הגל הנכנס. נשים לב כי מצבים אלה מתקבלים עבור k ממשי ולכן הינם פיזיקליים. דרך נוספת לראות זאת היא להתבונן בפונקציה הרדיאלית

לאחר הצבת הפתרון עבור A מתוך (1):

$$(4)\qquad rR_0 = \begin{cases} \frac{\sin(kR+\delta_0)}{\sin kR}\sin kr & r<R \\ \sin(kr+\delta_0) & r>R \end{cases}$$

כאשר $kR=n\pi$ מקדם הסינוס עבור $r<R$ מתבדר. הפונקציה המנורמלת מכילה לכן רק את המצב הקשור בתוך הבור המושרה על ידי הקליפה כבור התחום האינסופי.

מה קורה כאשר γ גדול אך סופי כלומר במצב בו קיים צימוד (חלש) בין פנים הכדור למרחב החיצוני?
הקוטב של S_0 מוגדר על ידי המשוואה

$$e^{2ikR} = 1 - i\frac{\hbar^2 k}{m\gamma}$$

עבור γ גדול הקטבים נמצאים ליד $kR = n\pi$. נפתח עד סדר שני ב $1/\gamma$: $kR = n\pi + \varepsilon_1 + \varepsilon_2$
נציב במשוואה ונפתח עד סדר שני ב $1/\gamma$:

$$1 + 2i\varepsilon_1 + 2i\varepsilon_2 - 2\varepsilon_1^2 = 1 - i\frac{\hbar^2 n\pi}{m\gamma R} - i\frac{\hbar^2 \varepsilon_1}{m\gamma R}$$

מהשוואת איברים מאותו סדר נקבל

$$kR = n\pi\left[1 - \frac{\hbar^2}{2m\gamma R} + \left(\frac{\hbar^2}{2m\gamma R}\right)^2\right] - i\left(\frac{\hbar^2 n\pi}{2m\gamma R}\right)^2$$

הקטבים כעת מחוץ לציר הממשי לחצי המישור התחתון שאינו פיזיקלי. מה משמעות מצב עם $k = k_0 - i\kappa$?
אם נתבונן ב"אנרגיה" שלו נקבל

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_0^2 - \kappa^2) - i\frac{\hbar^2}{m}k_0\kappa \equiv E_0 - i\frac{\Gamma}{2}$$

והתפתחות בזמן שלו תהיה $e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}t}$ כך שפונקצית ההסתברות $|rR_0(t)|^2 \propto e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t}$
ניתן לחשוב על מצבים כאלה כ "quasi bound states" מצבים שבהעדר צימוד בין פנים הכדור והמרחב החיצוני היו מצבים קשורים אמיתיים של הקליפה הכדורית אך בנוכחות צימוד כזה הם עלולים לחוק באמצעות מינהור לכיוון המצבים מחוץ לקליפה - בדיוק התוצאה שקיבלנו בנוסחת Wigner-Weiskopf.

מהו האפקט של קטבים מסוג זה על ציר k הממשי (הפיזי) אותו אנו יכולים לסרוק בניסוי פיזור?
נתבונן בתוצאה (3) ל S_0 וממנה נקבל

$$\delta_0 = -kR + \frac{1}{2}\mathrm{Arg}\left[\sin kR + \frac{\hbar^2 k}{2m\gamma}e^{ikR}\right]$$

עבור מרבית ערכי kR האיבר השני בסוגריים זניח לעומת הראשון (אנו דנים במקרה בו γ גדול)
ו $\delta_0 = -kR$ - בדיוק התוצאה שקיבלנו במקרה של ה hard sphere. רק בסביבת הנקודות
$kR = n\pi$ האיבר הראשון הופך קטן ו $\delta_0 + kR$ משתנה מ 0 ל π (עבור n זוגי)

או מ π ל 2π (עבור n אי זוגי) כאשר kR חולף דרך הרזוננס. קיבלנו לכן שכל ההתנהגות החלקה של δ_0, ולכן גם של σ_0, מורכבת קפיצות של ה phase shift ב π כאשר k חולף דרך רזוננס. נראה מיד מה השפעת קפיצות אלה על σ_0. לפני כן נשים לב מתוך הביטוי לפונקצית הגל (4) שכל עוד k לא נמצא בקרבת הרזוננס $\delta_0 \simeq -kR$ ופונקצית הגל למעשה מתאפסת בתוך הקליפה - הגל הבודד לא חודר את הפוטנציאל. רק ברזוננס שבו מקדם הפונקציה בתוך הקליפה מגיע לערך מקסימלי $\frac{\sin(kR+\delta_0)}{\sin kR}=1$ (אני משאיר לכם להראות זאת כתרגיל) הגל חודר את הקליפה ופונקצית הגל משמעותית שם.

בסביבת קוטב בקרבת הציר הממשי ב $k=k_0-i\kappa$ נוכל לקרב את S בסביבתו על ידי

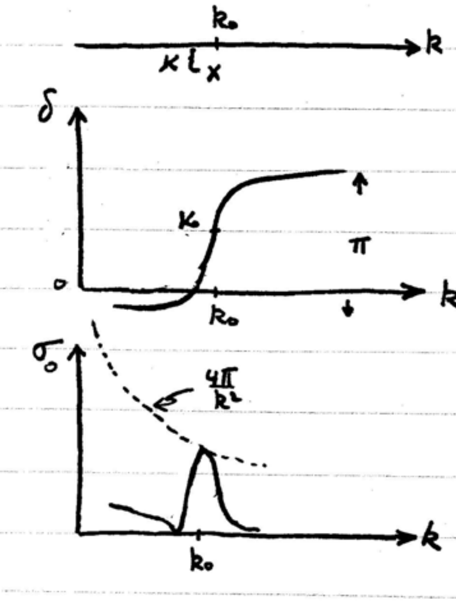
$$S=e^{2i\delta}=e^{2i\theta}\frac{k-k_0-i\kappa}{k-k_0+i\kappa}$$

כשהשתמשנו בדרישת האוניטריות $|S|^2=1$. $e^{2i\theta}$ הינה התרומה החלקה של הרקע. אם נתעלם ממנו נקבל

$$\cos 2\delta=\frac{(k-k_0)^2-\kappa^2}{(k-k_0)^2+\kappa^2}\qquad \sin 2\delta=\frac{2(k-k_0)\kappa}{(k-k_0)^2+\kappa^2}$$

$$\Rightarrow \sin^2\delta=\frac{1}{2}(1-\cos 2\delta)=\frac{\kappa^2}{(k-k_0)^2+\kappa^2}$$

תרומת הרזוננס לחתך הפיזור היא לכן לורנציאן סביב k_0 ברוחב κ. אם נוסיף אותה לתרומת הרקע החלקה נקבל באופן סכמטי:



ניתן להציג את התוצאה גם כפונקציה של האנרגיה תוך שימוש ב

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}(k-k_0+k_0)^2=\underbrace{\frac{\hbar^2k_0^2}{2m}}_{E_0}+\frac{\hbar^2}{m}k_0(k-k_0)+O(k-k_0)^2$$

כך שנרשום

$$k-k_0\simeq\frac{m}{\hbar^2k_0}(E-E_0)\ ,\quad \kappa\equiv\frac{m}{\hbar^2k_0}\frac{\Gamma}{2}$$

$\Leftarrow$ __נוסחת Breit-Wigner__:

$$\sin^2\delta=\frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(E-E_0)^2+\frac{\Gamma^2}{4}}$$