

6. Nestacionarioji sklaidos teorija.

Vienmatis uždavinys

Ankstesnėse paskaitose nagrinėta stacionarioji sklaidos teorija pagrįsta intuityviomis prielaidomis ir nėra laisva nuo vidinių prieštaravimų. Stacionariojoje sklaidos teorijoje į sklaidos centrą skriejančių dalelių aprašymas plokščia banga prieštarauja kvantinei mechanikai, nes joje tiksliai kvadratiškai integruojamos (banginės funkcijos kvadrato integralas turi būti baigtinis) funkcijos aprašo realią fizikinę būseną. Plokščios bangos tokios nėra. Iškreiptos bangos $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ taip pat nėra kvadratiškai integruojamos.

Pasirodo, kad sklaidos uždavinį suformulavus kaip nestacionarų, skaičiavimo metodus, sukurtus stacionarioje sklaidos teorijoje, galima griežtai pagrįsti, t.y. parodyti, kad jie teisingi.

Nestacionarioje sklaidos teorijoje dalelių sklaida nagrinėjama kaip bangų paketų sklidimas. Pradėsime nuo paprastesnio uždavinio nei buvo nagrinėta antroje paskaitoje. Panagrinėsime vienmačio judėjimo uždavinį. Tegul dalelių, kurių masė μ ir judėjimo kiekis k , srautas juda išilgai x ašies ir savo kelyje sutinka stačiakampį barjerą. Surasime dalelių praėjimo ir atspindžio koeficientus $T(k)$ ir $R(k) = 1 - T(k)$. Dažnai šis uždavinys laikomas vienu paprasčiausių kvantinėje mechanikoje dėl matematinio paprastumo, kai naudojama stacionari teorija (A.Bandzaitis ir D.Grabauskas, "Kvantinė mechanika", p. 95). Ištikrųjų taip ir yra, jeigu dalelės, skriejančios į barjerą aprašomos plokščia banga

$$\phi_0(x) = e^{ikx}. \quad (1)$$

Tuomet stacionariosios Šredingerio lygties sprendinys yra šitoks:

$$\psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + C_1 e^{-ikx}, & x < 0, \\ C_2 e^{\kappa x} + C_3 e^{-\kappa x}, & 0 \leq x \leq a, \\ C_4 e^{ikx}, & x > a. \end{cases} \quad (2)$$

Čia k ir κ susiję su dalelių kinetine energija dydžiai:

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2\mu(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (3)$$

(2) lygtis užrašyta $E < V_0$ atvejui, todėl κ yra menamas dydis. Koeficientas C_1 aprašo atspindėtos, o C_4 – praėjusios bangos intensyvumus:

$$R = |C_1|^2; \quad T = |C_4|^2. \quad (4)$$

Koeficientų C_1, C_2, C_3 ir C_4 reikšmės surandamos iš banginės funkcijos ir jos išvestinės reikšmių lygybės ant barjero ribų (vadinama funkcijų susiuvimu, nes visoje srityje $-\infty < x < +\infty$

funkcija negali turėti trūkių). Praleidžiame visus išvedimus ir užrašome praėjimo tikimybę (žr. A.Bandzaičio ir D.Grabausko “Kvantinės mechanikos” vadovėlio 107-108 puslapius ir (5.59) formulę):

$$T = 1 - R = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2(\kappa a) + 4k^2\kappa^2}. \quad (5)$$

Šis nagrinėjimas labai panašus į antroje paskaitoje nagrinėtą stacionarų sklaidos uždavinį. Dabar eisime kitu keliu ir surasime tas pačias formules (4) ir (5). Pradiniu laiko momentu $t = 0$ dalelės būseną aprašysime bangų paketu:

$$\psi(x, t = 0) = \Phi(x) = e^{ikx} \chi(x - x_0), \quad (6)$$

kur $\chi(x)$ – kažkokia varpo formos funkcija su maksimumu apie tašką $x = x_0$. Bangų paketas aprašo dalelę, lokalizuotą apie tašką $x = x_0$ ir judančią vidutiniu greičiu $v_0 = \hbar k / \mu$. Tegul $x_0 < 0$, o $k > 0$. Šiuo atveju bangų paketas juda iš kairės į dešinę, kaip parodyta 1 pav. Barjero plotis yra a . Srityje iki barjero bangų paketas juda laisvai. Toks judėjimas trunka $t_0 = |x_0| / v_0$ laiko. Žinoma, kad laisvai judantis bangų paketas per laiką t_0 išplinta, ir tuo labiau, kuo didesnis jo judėjimo kiekio p neapibrėžtumas Δp ($\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$) arba kuo mažesnis jo koordinatės x_0 neapibrėžtumas. Išplitimo didumas aprašomas dispersija, kuri parodo nuokrypį nuo vidutinės vertės. Taigi Gauso formos

$$\chi(x - x_0) = \frac{1}{b^{1/2} \pi^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2b^2}} \quad (7)$$

paketo, kurio plotis pusėje aukščio yra b , koordinatės pradinė dispersija $D_x(t = 0) = b^2/2$ padvigubėja per laiką

$$\tau = \mu b^2 / \hbar. \quad (8)$$

(8) formulė gauta (6) ir (7) įrašius į dispersijos apibrėžimą bei panaudojus $x \equiv v_0 t$.

Toliau paprastumo dėlei naudosimės prielaida, kad dalelės erdvinio pasiskirstymo (6) dispersija yra tiek didelė, jog į paketo išplitimą per laiką t_0 galima nekreipti dėmesio ($b \ll k$). Gauso formos bangų paketui tai reiškia, kad

$$b^2 \gg x_0 / k. \quad (9)$$

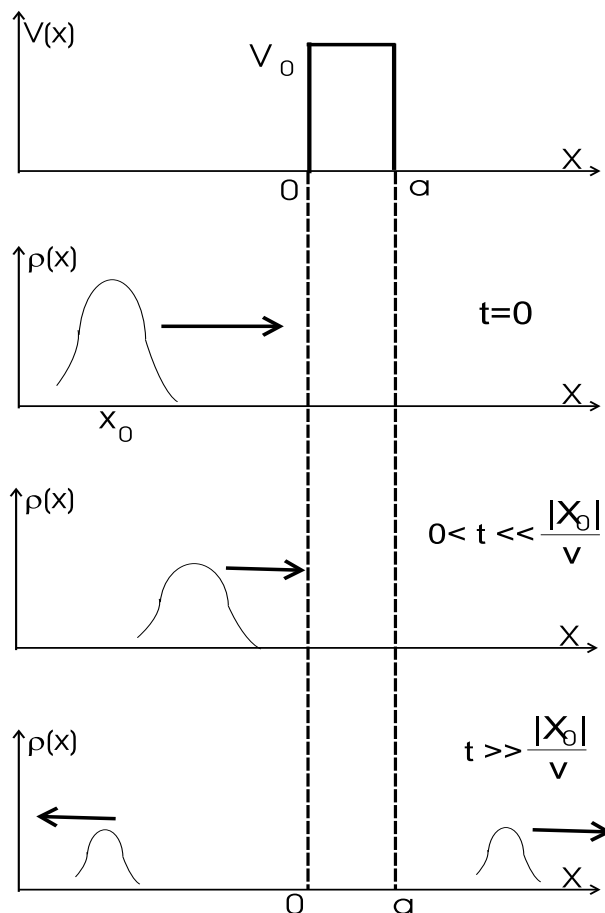
Tą pačią nelygybę naudinga parašyti ir dalelės judėjimo kiekio dispersijai:

$$D_p = 1/2b^2 \ll k/2x_0. \quad (10)$$

Skirtingai nuo koordinatės dispersijos judėjimo kiekio dispersija nesikeičia, kai dalelė juda laisvai.

Patogiau naudoti dalelės banginės funkcijos (6) Furje atvaizdą:

$$\chi(x - x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa A(\kappa) e^{i\kappa(x-x_0)}. \quad (11)$$



1 pav. Bangų paketo sklaida potencialo barjeru. Vienmatis uždavinys.

Palyginus (6) ir (11) formules, galima suprasti, kad varpo formos funkcija $\chi(x - x_0)$ iš (6) formulės atitinka varpo formos funkciją $A(\kappa)$ iš (11) formulės. Laikysime, kad laiko momentu $t = 0$ pradiniai paketo matmenys daug mažesni už atstumą tarp paketo svorio centro x_0 ir barjero $x = a$. Kartu su (9) sąlyga $b^2 \gg x_0/k$ tai reiškia, kad $A(\kappa)$ iš (11) pasiskirstymo plotis daug mažesnis už dalelės vidutinį judėjimo kiekį k ($b \ll k$).

Skaidos uždavinio sprendimo tikslas – surasti skaidos banginę funkciją, kuri yra nuo laiko priklausančios Šredingerio lygties

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t) \quad (12)$$

sprendinys, patenkinantis (6) pradinę sąlygą. Iš kvantinės mechanikos žinome, kad (12) lygties bendrąjį sprendinį galime užrašyti stacionariosios Šredingerio lygties

$$\hat{H} \psi_k(x) = E_k \psi_k(x) \quad (13)$$

sprendinių superpozicija. Parodysime, kad mums reikalingas (12) lygties sprendinys, tenkinantis

(6) pradinę sąlygą, gali būti parinktas šitoks:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk' A(k' - k) e^{-i(k'-k)x_0} \psi_{k'}(x) e^{-iE_{k'}t/\hbar}. \quad (14)$$

Čia $\psi_{k'}(x)$ yra ne kas kitas, o gerai žinomas stacionariosios Šredingerio lygties (13) sprendinys (2).

Kadangi padarėme prielaidą, kad $A(k' - k) \ll k$, išraiškoje (14) po integralo ženklu $E_{k'}$ galima pakeisti apytikre išraiška:

$$E_{k'} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2\mu} \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2}{\mu} k(k' - k) = E_k + \hbar v_0(k' - k). \quad (15)$$

Čia $v_0 = \hbar k/p$, ir skleidžiame eilute apie vidutinę judėjimo kiekio verę k . Antros eilės nariai atmetami. Todėl (14) išraiška supaprastėja:

$$\psi(x, t) = e^{-iE_k t/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk' A(k' - k) e^{-i(k'-k)(x_0+v_0 t)} \psi_{k'}(x). \quad (16)$$

Irašysime (2) į (16) išraišką su koeficientais C_1 , C_2 , C_3 ir C_4 , surastais iš funkcijų susiuvimo ant potencialo barjero ribų. Tuomet srityse iš kairės ir dešinės nuo barjero banginė funkcija turi šitokias išraiškas:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) \Big|_{x<0} &= e^{ikx} e^{-iE_k t/\hbar} \chi(x - (x_0 + v_0 t)) + C_1 e^{-ikx} e^{-iE_k t/\hbar} \chi(-x - (x_0 + v_0 t)), \\ \psi(x, t) \Big|_{x>a} &= C_4 e^{ikx} e^{-iE_k t/\hbar} \chi(x - (x_0 + v_0 t)). \end{aligned} \quad (17)$$

Kai $t = 0$,

$$\begin{aligned} \psi(x, t = 0) \Big|_{x<0} &= e^{ikx} \chi(x - x_0) + C_1 e^{-ikx} \chi(-x - x_0), \\ \psi(x, t = 0) \Big|_{x>a} &= C_4 e^{ikx} \chi(x - x_0). \end{aligned} \quad (18)$$

Dabar reikia prisiminti, kad $\chi(x)$ pasiskirstymo plotis daug mažesnis už x_0 . Tai reiškia, kad laiko momentu $t = 0$ į sritį $x < 0$ patenka funkcijos $\chi(-x - x_0)$ tikslai uodega. Lygiai taip pat į sritį $x > 0$ patenka funkcijos $\chi(x - x_0)$ uodega. Jeigu į šias uodegas nekreipsime dėmesio ir atsižvelgsime į $\chi(x)$ specifines savybes, pamatysime, kad (18) išraiška ekvivalentiška (6) sąlygai visoje $-\infty < x < +\infty$ srityje.

Taigi parodėme, kad (14) pavidalo banginė funkcija $\psi(x, t)$ tenkina ir nestacionariąją Šredingerio lygtį (12) ir pradinę sąlygą (6), kas reiškia, kad ji yra mūsų nagrinėjamo uždavinio sprendinys.

Panagrinėkime šio sprendinio fizikinę prasmę. Tam tikslui patogiau pasinaudoti (17) išraiška. Srityje $x < 0$, kai $t < |x_0|/v_0$, svarbus tikslai pirmasis sumos narys, aprašantis dalelės judėjimą iš

kairės į dešinę, o $t > |x_0|/v_0$ atveju – tikrai antrasis narys, aprašantis dalelės judėjimą priešinga kryptimi, t.y. iš dešinės į kairę. Į sritį $x > 0$ dalelė su pastebima tikimybe prasiskverbia tikrai tuo atveju, kai $t > |x_0|/v_0$ ir toliau visą laiką juda į dešinę, toldama nuo barjero. Visi šie rezultatai pavaizduoti 1 pav., kuriame pavaizduotas dalelės koordinatės tankio pasiskirstymas $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ į vairiais laiko momentais. Rodyklės rodo dalelės judėjimo kryptį.

Dalelės perėjimo per barjerą koeficientas yra lygus tikimybei rasti dalelę srityje $x > a$ laiko momentu $t \gg t_0$:

$$T = W(x > a) = \int_a^\infty |\psi(x, t)|^2 dx = C_4 \int_a^\infty |\chi(x - (x_0 + v_0 t))|^2 dx = |C_4|^2. \quad (19)$$

Analogiškai apskaičiuojamas ir atspindžio koeficientas:

$$R = W(x < a) = \int_{-\infty}^0 |\psi(x, t)|^2 dx = C_1 \int_{-\infty}^a |\chi(-x - (x_0 + v_0 t))|^2 dx = |C_1|^2. \quad (20)$$

Gavome, kad (19) ir (20) formulės yra tokios pat, kaip ir stacionariosios teorijos atveju (4) išraiškos. Reikia pastebėti, kad funkcijai $\psi_k(x)$, kuri nestacionarioje teorijoje surandama tam, kad būtų galima apskaičiuoti dalelės praėjimo ir atspindžio koeficientus, galima nesuteikti jokios fizikinės prasmės. Ji taip pat nėra kvadratiškai integruojama ir neaprašo jokių realių būsenų.

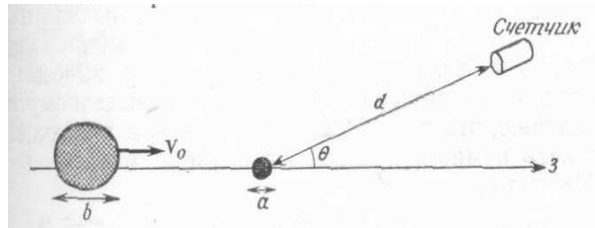
Trimatis uždavinys. Asimptotinės būsenos. Sklaidos operatorius.

Stacionarioje teorijoje buvo nagrinėjamas pastovaus vienalyčio dalelių, kurių greitis gerai žinomas, srauto išsklaidymas nejudančiu jėgos centru. Tikslas – žinant dalelės sąveikos su centru dėsnį, surasti diferencialinį skerspjūvį. Prisiminkime, kaip sklaidos uždavinys sprendžiamas klasikinėje mechanikoje. Ten pasinaudojant judėjimo lygtimis, nustatoma dalelės judėjimo trajektorija ir pagal jos asimptotiką surandamas sąryšis tarp prisitaikymo parametro b ir sklaidos kampo $\rho = \rho(\theta)$. Paskui pagal šį santykį apskaičiuojamas diferencialinis sklaidos skerspjūvis:

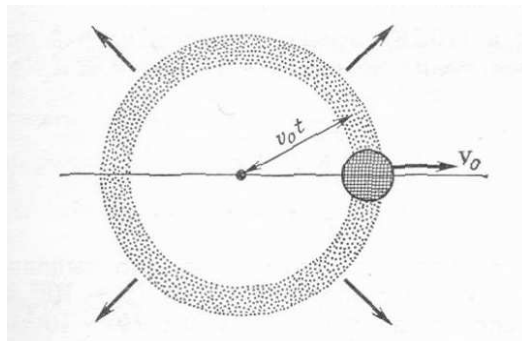
$$d\sigma = 2\pi\rho d\rho = \frac{\rho(\theta)}{\sin\theta} \left| \frac{d\rho(\theta)}{d\Omega} \right| d\Omega. \quad (21)$$

Kvantinėje mechanikoje nėra dalelės trajektorijos sąvokos. Dalelė niekada nebūna tiksliai lokalizuota erdvėje ir neturi apibrėžto judėjimo kiekio. Ankstesniame skyriuje matėme, kad dalelės judėjimas erdvėje tėra bangų paketo evoliucija. Įsivaizduokime bangų paketą, kuris pradinio laiko momentu yra pakankamai toli nuo jėgos centro ir juda su vidutiniu judėjimo kiekiu \mathbf{p}_0 link jėgos centro. Laikui bėgant bangų paketas plėsdamasis pasiekia jėgos centrą ir visu savo tūriu įeina į sąveikos sritį, kurioje daugiau ar mažiau deformuojasi, po to palieka sąveikos sritį plačiu nesimetrišku debesėliu (žr. 2 ir 3 pav.). Išsklaidytos dalelės patekimo į detektorių,

esantį kažkur toli nuo jėgos centro, tikimybė proporcinga tikimybės tankiui rasti dalelę atitinkame detektoriaus taške. Bendrais bruožais šis vaizdas nesiskiria nuo vienmačio bangų paketo judėjimo. Tačiau trimačiu atveju pasekti paketo evoliuciją laike, naudojant panašias į vienmačio uždavinio formules, techniškai labai sunku. Todėl teks naudoti ypatingą matematinį aparatą ir daug naujų sąvokų.



2 pav. Prieš susidūrimą (laiko momentu $t = 0$) bangų paketas greičiu v_0 juda link taikinio.



3 pav. Po susidūrimo (laiko momentu $t \gg 0$) neišsklaidytas paketas tęsia judėjimą greičiu v_0 , o išsklaidyta banga plinta į visas puses. Ji nelygi nuliui viduje sferos, kurios spindulys $v_0 t$.

Tegul laiko momentu $t = 0$ dalelės būseną aprašoma kvadratiškai integruojama funkcija $\psi_0(\mathbf{r})$. Ji kartu su hamiltonianu \hat{H} pilnai aprašo visą nenutrūkstamą seką būsenų $\psi(\mathbf{r}, t)$, per kurias praecina bangų paketas laike prieš momentą $t = 0$ ir po jo, kai $t > 0$. Kartais sakoma, kad funkcija $\psi_0(\mathbf{r})$ nusako visą kvantinę "trajektoriją" arba kvantinę "orbitą", kuria juda dalelė (paketas).

Pasekti dalelės "trajektoriją" galima evoliucijos operatoriaus

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (22)$$

pagalba, kur $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ – pilnas sistemos hamiltonianas, o funkciją galima užrašyti šitaip (A.Bandzaitis ir D.Graubauskas "Kvantinė mechanika", p. 77, formulė (4.9)):

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \phi_0(\mathbf{r}) = \hat{U}(t)\psi_0(\mathbf{r}). \quad (23)$$

Evoliucijos operatorius tenkina unitariškumo sąlygą:

$$\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1, \quad (24)$$

todėl (23) funkcijos normavimas paketo evoliucijos metu nesikeičia.

Kai $t \rightarrow -\infty$, taip pat $t \rightarrow +\infty$, bangų paketo pagrindinė dalis yra toli už jėgos veikiamos srities, t.y. jis yra laisvas. Šioje srityje jo evoliuciją valdo ne hamiltonianas \hat{H} , bet laisvos dalelės hamiltonianas \hat{H}_0 . Šiai sričiai įvesime atitinkamą evoliucijos operatorių:

$$\hat{U}_0(t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \quad (25)$$

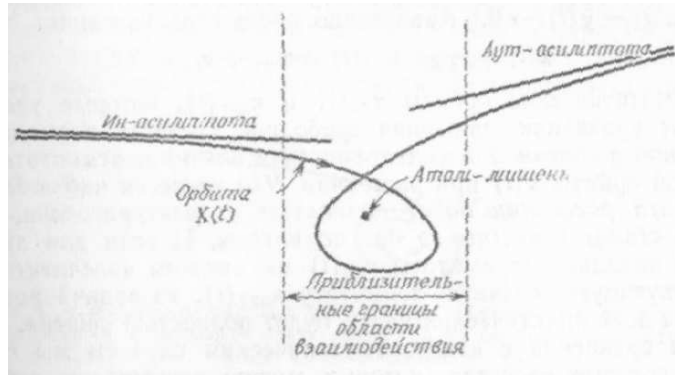
Kai $t \rightarrow +\infty$, nagrinėjama "trajektorija" artėja prie laisvos dalelės judėjimo, kuri galima aprašyti šia funkcija:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \Big|_{t \rightarrow +\infty} = \hat{U}_0(t)\psi_{out}(\mathbf{r}). \quad (26)$$

Analogiškai laikui $t \rightarrow -\infty$,

$$\psi(\mathbf{r}, t) \Big|_{t \rightarrow -\infty} = \hat{U}_0(t)\psi_{in}(\mathbf{r}). \quad (27)$$

Būsenos $\psi_{in}(\mathbf{r})$ ir $\psi_{out}(\mathbf{r})$, aprašančios dalelės "trajektorijos" (23) asimptotines (26) ir (27) savybes laiko momentu $t \rightarrow \pm\infty$, vadinamos **asimptotinėmis būsenomis** arba nagrinėjamos "trajektorijos" **įeinančia** (*in*) ir **išeinančia** (*out*) **asimptotėmis** (žr. 4 ir 5 pav.).

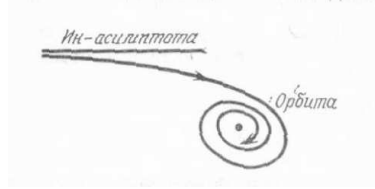


4 pav. Tipiška sklaidos orbita.

Kaip ir visą "trajektoriją", dalelės asimptotes galima surasti iš bangų paketo $\psi_0(\mathbf{r})$. (26) ir (27) dauginame iš kairės iš \hat{U}_0^+ ir ieškome atitinkamos ribos. Po to įrašome $\psi(\mathbf{r}, t)$ išraišką į (23) ir gauname šitokias išraiškas:

$$\psi(\mathbf{r})_{in} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{U}_0^+(t)\hat{U}(t)\psi_0(\mathbf{r}) = \hat{\Omega}_+^+\psi_0(\mathbf{r}), \quad (28)$$

$$\psi(\mathbf{r})_{out} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \hat{U}_0^+(t)\hat{U}(t)\psi_0(\mathbf{r}) = \hat{\Omega}_-^+\psi_0(\mathbf{r}). \quad (29)$$

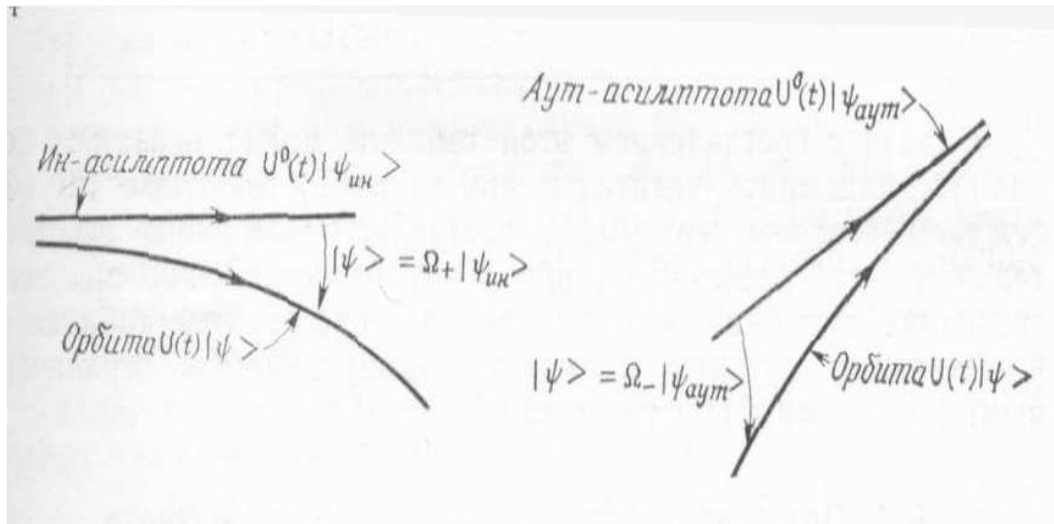


5 pav. Pakankamai stipriems traukos potencialams iš begalybės atliekianti dalelė gali būti pagauta į spiralinę orbitą ir niekada neišsilaisvinti.

Čia įvesti du nauji operatoriai, kurie vadinami **Miolerio operatoriais** (žr. 6 pav.):

$$\hat{\Omega}_{\mp} = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \hat{U}^+(t) \hat{U}_0(t). \quad (30)$$

Miolerio operatorių ženklai parinkti taip, kad būtų patogiau pereiti prie stacionariosios sklaidos teorijos. Jie taip pat unitariniai. Uninariškumas seka iš (24) išraiškos.



6 pav. Klasikinis Miolerio operatorių įsivaizdavimas.

Naudojant Miolerio operatorius galima susieti išeinančią ir įeinančią asimptotes. Tam tikslui išrašome (30) į (28) ir (29):

$$\psi_{out}(\mathbf{r}) = \hat{\Omega}_-^+ \hat{\Omega}_+ \psi_{in}(\mathbf{r}). \quad (31)$$

(31) formulę galima užrašyti kompaktiškiau, įvedant **sklaidos operatorių** arba **S operatorių**,

$$\hat{S} = \hat{\Omega}_-^+ \hat{\Omega}_+, \quad (32)$$

$$\psi_{out}(\mathbf{r}) = \hat{S} \psi_{in}(\mathbf{r}). \quad (33)$$

Iš Miolerio operatorių seka ir S operatoriaus unitariškumas:

$$\hat{S}^+ \hat{S} = \hat{S} \hat{S}^+ = 1. \quad (34)$$

S operatorius ir jam atitinkanti S matrica yra vieni iš pagrindinių sklaidos teorijos sąvokų. Sklaidos eksperimente detektorius yra labai toli nuo vietos, kurioje vyksta sklaida, todėl atstumus ir laikus galima laikyti asimptotiškai dideliais. Kvantinės ir klasikinės sklaidos teorijų uždavinys – pagal įeinančios dalelės būsenos parametrus nustatyti išeinančios dalelės būsenos parametrus. Tai, kas vyksta sklaidos centre, kur asimptotė *in* pereina į asimptotę *out*, neturi praktinės reikšmės. Būtent sklaidos S operatorius ir perveda dalelę iš $\psi_{in}(\mathbf{r})$ į $\psi_{out}(\mathbf{r})$ būseną.

Diferencialinis sklaidos skerspjuvis nestacionariojoje teorijoje.

Suformuluosime kvantinės mechanikos sklaidos diferencialinį skerspjuvį kiek galima panašiau į klasikinę mechaniką. Laikysime, kad žinomi dalelės kvantinės "trajektorijos" pradiniai parametrai, t.y. vidutinis prisitaikymo atstumas ρ_0 ir vidutinis judėjimo kiekis \mathbf{p}_0 . Tegul \mathbf{p}_0 nukreiptas z ašies kryptimi. Konkretumo dėlei panagrinėsime keletą ψ_{in} paketo pavyzdžių.

Tegul turime paketą ties tašku $\mathbf{r}=0$ koordinatiniame vaizdavime:

$$\psi_{in}^{(A)}(\mathbf{r}) \sim e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{b}\right)^2} e^{ip_0 z} = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\rho}{b}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{b}\right)^2} e^{ip_0 z}. \quad (35)$$

Jis simetriškai pasklidęs apie tašką $\mathbf{r}=0$ visomis kryptimis. Judėjimo kiekio vaizdavime (Bandzaitis ir Grabauskas, 63 psl.) paketas aprašomas šitokia funkcija (de Broilio banga yra tikrinė judėjimo kiekio funkcija):

$$\psi_{in}^{(A)}(\mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{p} | \psi_{in}^{(A)} \rangle \sim e^{-\frac{1}{2}(b\mathbf{p}_\perp)^2} e^{-\frac{1}{2}b^2(p_z - p_0)^2}. \quad (36)$$

Čia p_z ir \mathbf{p}_\perp – judėjimo kiekio išilginė ir skersinė dedamosios.

Kitas bangų paketas koordinatiniame vaizdavime

$$\psi_{in}^{(B)}(\mathbf{r}) \sim e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\rho - \rho_0}{b}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{b}\right)^2} e^{ip_0 z} \quad (37)$$

toks pat kaip ir A atvejo, tiksliai jo centras paslinktas per ρ_0 statmena z ašiai kryptimi. Judėjimo kiekio vaizdavime jis aprašomas šitokia funkcija:

$$\psi_{in}^{(B)}(\mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{p} | \psi_{in}^{(B)} \rangle \sim e^{-\frac{1}{2}(b\mathbf{p}_\perp)^2} e^{-\frac{1}{2}b^2(p_z - p_0)^2} e^{-i\mathbf{p}_\perp \rho_0}. \quad (38)$$

Jeigu $\Phi_0(\mathbf{p})$ yra bet koks paketas, kurio svorio centras yra ant z ašies, tai

$$\langle \mathbf{p} | \psi_{in} \rangle = e^{-i\mathbf{p}_\perp \rho_0} \Phi_0(\mathbf{p}) \quad (39)$$

yra paketas, kurio svorio centras paslinktas per ρ_0 , statmenai z ašiai.

Dabar galime pereiti prie bendro atvejo. Tegul žinoma dalelės pradinė būseną ψ_{in} . Tikimybė, kad idealus detektorius užregistruos dalelės galinės būsenos judėjimo kiekį intervale d^3p , yra:

$$dw(\mathbf{p}) = |\langle \mathbf{p} | \psi(t \rightarrow +\infty) \rangle|^2 d^3p, \quad (40)$$

kur sutinkamai su (23) formule banginė funkcija $\psi(t)$ aprašo paketo evoliuciją. Atsižvelgiant į tai, kad $|\mathbf{p}\rangle$ yra tikrinės $\hat{U}_0(t)$ evoliucijos operatoriaus funkcijos, ir panaudojant (26) sąryšį, (40) formulę galima perrašyti šitaip:

$$dw(\mathbf{p}) = |\langle \mathbf{p} | \psi_{out} \rangle|^2 d^3p. \quad (41)$$

Panaudojant S matricos apibrėžimą (33) ir jos sąryšį su sklaidos amplitude

$$\langle \mathbf{k}' | \hat{S} | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{i\hbar^2}{2\pi\mu} \delta(E_k - E_{k'}) f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$$

susiesime judėjimo kiekio pasiskirstymo amplitudę pradinėje būsenoje su judėjimo kiekio pasiskirstymo amplitude galinėje būsenoje:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \psi_{out} \rangle &= \langle \mathbf{p} | \hat{S} | \psi_{in} \rangle = \langle \mathbf{p} | \psi_{in} \rangle \\ &+ \frac{i\hbar^2}{2\pi\mu} \int d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) \langle p' | \psi_{in} \rangle. \end{aligned} \quad (42)$$

Kadangi realiuose eksperimentuose detektorius visuomet stovi į šoną nuo krentančių dalelių srauto krypties, galima laikyti, kad jis neregistruoja (42) būsenos pirmojo nario. Tuomet

$$\langle \mathbf{p} | \psi_{out} \rangle \rightarrow \frac{i\hbar^2}{2\pi\mu} \int d^3p' \delta(E_p - E_{p'}) f(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) \langle p' | \psi_{in} \rangle. \quad (43)$$

Dalelių su fiksuotu prisitaikymo parametru sklaidos tikimybė yra:

$$\begin{aligned} dw(\mathbf{p}) \Big|_{\rho_0} &= \frac{d^3p}{4\pi^2\mu^2} \int \int d^3p' d^3p'' \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_p - E_{p''}) \\ &\times f(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) f^*(\mathbf{p}'' \rightarrow \mathbf{p}) e^{-i(\mathbf{p}'_{\perp} - \mathbf{p}''_{\perp})\rho_0} \Phi_0(\mathbf{p}') \Phi_0^*(\mathbf{p}''). \end{aligned} \quad (44)$$

Patekusių į detektorių dalelių, kurių judėjimo kiekis yra intervale d^3p , skaičius yra lygus integralui pagal prisitaikymo parametą ρ_0 plokštumoje, statmenoje z ašiai, padaugintas iš krentančių dalelių srauto tankio \mathbf{j}_0 . Prileidę, kad $j_0 = 1$ (vienetinis srauto tankis), surandame diferencialinį skerspjūvį ($d\sigma = dw/j_0$):

$$d\sigma = dw(\mathbf{p}) \Big|_{\rho_0} d^2\rho_0 = \frac{d^3p}{4\pi^2\mu^2} \int d^2\rho_0 \int \int d^3p' d^3p'' \delta(E_p - E_{p'}) \delta(E_p - E_{p''})$$

$$\times f(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) f^*(\mathbf{p}'' \rightarrow \mathbf{p}) e^{-i(\mathbf{p}'_{\perp} - \mathbf{p}''_{\perp}) \rho_0} \Phi_0(\mathbf{p}') \Phi_0^*(\mathbf{p}''). \quad (45)$$

Integravimas ρ_0 atžvilgiu atneša $\delta(p'_{\perp} - p''_{\perp})$, kurią kartu su $\delta(E_{p'} - E_{p''})$ galima pertvarkyti šitaip:

$$\delta(\mathbf{p}'_{\perp} - \mathbf{p}''_{\perp}) \delta(E_{p'} - E_{p''}) = \frac{\mu}{p'_z} \delta(\mathbf{p}'_{\perp} - \mathbf{p}''_{\perp}) \delta(p'_z - p''_z) = \frac{\mu}{p'_z} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}''). \quad (46)$$

Integravimas pagal $d^3 p''$ atneša $4\pi^2$ bei $p' = p''$ ir

$$d\sigma = \frac{d^3 p}{\mu^2} \int d^3 p' \frac{\mu}{p'_z} \delta(E_p - E_{p'}) |f(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})|^2 |\Phi_0(p')|^2. \quad (47)$$

Pakeitę tūrio elementą

$$d^3 p = p^2 dp d\Omega = \mu p dE_p d\Omega, \quad (48)$$

ir suintegravę pagal dE_p , pagaliau gauname galutinę diferencialinio skerspjuvio išraišką:

$$d\sigma = d\Omega \int d^3 p' \frac{p'}{p'_z} |f(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})|^2 |\Phi_0(p')|^2 \Big|_{E_p = E_{p'}}. \quad (49)$$

Padarius prielaidą, kad pradinio judėjimo kiekio \mathbf{p}' išsibarstymas apie vidutinę vertę yra labai mažas, tai p'/p'_z (49) integrale galima pakeisti vienetu, $f(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})$ galima pakeisti $f(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p})$, nes, esant mažam \mathbf{p}' išsibarstymui, ji mažai keičiasi, todėl ją galima iškelti prieš integralo ženklą. Kadangi pradinio bangų paketo funkcija $\Phi_0(p')$ normuota į vienetą

$$\int d^3 p' |\Phi_0(p')|^2 = 1, \quad (50)$$

(49) išraiška pereina į stacionariosios sklaidos teorijos skerspjuvio išraišką:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p})|^2. \quad (51)$$

Tokiu būdu, nuosekliai nagrinėdami, pasiekėme stacionariosios sklaidos teorijos rezultata. Tačiau (51) formulė galioja tik tuomet, kai

1) sklaidomų dalelių pluoštelis judėjimo kiekio erdvėje aprašomas gerai lokalizuotu bangų paketu;

2) detektorius yra už sklaidomų dalelių konuso, t.y. registruoja tiktai išsklaidytas daleles.

Raliuose eksperimentuose šios sąlygos visuomet būna patenkintos.