ЖЭТФ, 2013, том 143, вып. 3, стр. 444–452 © 2013

К ТЕОРИИ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

Б. Я. Балагуров *

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 сентября 2012 г.

Предложена теория рассеяния частиц малой энергии E на трехмерном потенциале произвольной величины. Получено точное выражение для амплитуды s-рассеяния в пределе $E \to 0$. Входящая в формулу для амплитуды резонансного рассеяния феноменологическая константа $\varkappa$ выражена через характерные для данного потенциала параметры.

DOI: 10.7868/S0044451013030048

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория упругого рассеяния медленных частиц достаточно подробно изложена в книге [1]. Как показано в [1], последовательный подход к этой задаче требует, вообще говоря, решения уравнения Шредингера при нулевой энергии, что представляет определенные трудности. Вместо этого используется формальный прием, когда на волновую функцию накладывается граничное условие [1], содержащее некоторую феноменологическую (не вычисляемую в теории) константу $\varkappa$. Такой подход позволяет дать качественную теорию резонансного рассеяния медленных частиц на потенциале с «мелким» реальным или виртуальным уровнем энергии. Кроме того, на ряде точно решаемых примеров [1, 2] было показано, что амплитуда s-рассеяния f_s в пределе $E \to 0$ проходит бесконечное число «резонансов» по мере углубления потенциальной ямы. Однако для произвольного потенциала аналогичные результаты отсутствуют.

В настоящей работе предложена последовательная теория упругого рассеяния медленных частиц. Для центрально-симметричного потенциала произвольной величины найдено явное выражение для амплитуды s-рассеяния f_s. При решении уравнения Шредингера с нулевой энергией применен подход, основанный на квантовании амплитуды потенциала (глубины потенциальной ямы) — см., например, работу [3], где этот метод достаточно подробно изложен для одномерного случая[1)]. В настоящей работе сначала исследуются основные свойства собственных функций $\zeta_n(r)$ и собственных значений λ_n этого метода при нулевой энергии. Решение уравнения Шредингера при $E = 0$ ищется затем с помощью разложения волновой функции $\psi(r)$ по системе $\{\zeta_n(r)\}$. В результате амплитуда f_s упругого рассеяния медленных частиц (в том числе и упомянутая выше феноменологическая константа $\varkappa$) выражается через характерные для данного потенциала параметры, зависящие только от его формы. В пределе $E \to 0$ найденное в работе выражение для амплитуды $f_s(0)$ является точным.

Для иллюстрации полученных общих формул в работе рассмотрен конкретный пример — квантовомеханическая система с потенциалом экспоненциальной формы. В этом случае могут быть найдены точные выражения как для амплитуды $f_s(0)$, так и для собственных функций $\zeta_n(r)$ с соответствующими собственными значениями λ_n. Это позволяет провести детальную проверку предлагаемой теории — и выражения для амплитуды $f_s(0)$, и установленных в работе различных соотношений типа «правил сумм». Для справок в Приложении в краткой форме приведены аналогичные результаты еще для трех точно решаемых примеров.

2. СИСТЕМА СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

1. Рассмотрим трехмерную квантовомеханиче-

*E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

1) Отметим, что сходный, но более формальный, подход ранее был предложен в работах [4–6]. В то же время проблемы, затронутые в [3] и в этой работе, в [4–6] не рассматривались.

скую систему — частицу в поле потенциала $U(\mathbf{r})$. Представим потенциальную энергию в виде $U(\mathbf{r}) = U^0 v(\mathbf{r})$, где U^0 — амплитуда потенциала, а безразмерная функция $v(\mathbf{r})$ задает его форму. Стационарное уравнение Шредингера для частицы с энергией E запишем в виде

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \varepsilon\psi(\mathbf{r}) = \alpha\, v(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \tag{1}$$

где $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$, $\alpha = 2mU^0/\hbar^2$. При стандартном подходе [1] в качестве объекта квантования выбирается энергия. Для потенциала притяжения ($\alpha < 0$) при этом определяются (если они есть) уровни энергии ε_ν связанных состояний. В этом случае полную систему образует совокупность волновых функций дискретного ($\varepsilon < 0$) и непрерывного ($\varepsilon > 0$) спектров.

Возможен, однако, альтернативный подход, когда квантуется амплитуда потенциала (см., например, работу [3], где рассмотрен одномерный случай). Соответствующие собственные функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ регулярны и удовлетворяют уравнению

$$\nabla^2\varphi_\nu(\mathbf{r}) + \varepsilon\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \alpha_\nu\, v(\mathbf{r})\varphi_\nu(\mathbf{r}), \tag{2}$$

где α_ν — собственные значения. Величины $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и α_ν зависят от энергии: $\varphi_\nu = \varphi_\nu(\varepsilon;\mathbf{r})$ и $\alpha_\nu = \alpha_\nu(\varepsilon)$, причем $\alpha_\nu < 0$ при $\varepsilon \leqslant 0$. Система функций $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ ортонормирована согласно

$$\int \varphi_\mu(\mathbf{r})\varphi_\nu(\mathbf{r})\, v(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}, \tag{3}$$

где $\varphi_\mu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ относятся к одной и той же энергии.

Для потенциала притяжения ($\alpha < 0$) уровни энергии $\varepsilon_\nu = \varepsilon_\nu(\alpha)$ связанных состояний определяются из уравнения

$$\alpha_\nu(\varepsilon) = \alpha. \tag{4}$$

Волновая функция $\psi_\nu(\mathbf{r})$, отвечающая уровню энергии ε_ν, выражается через $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ при $\varepsilon = \varepsilon_\nu$ [3]. Предполагается, что система $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ образует полный набор, так что выполняется соотношение полноты в виде

$$v(\mathbf{r}) \sum_\nu \varphi_\nu(\mathbf{r})\varphi_\nu(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{5}$$

где функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r}')$ относятся к одной и той же энергии.

2. Рассмотрим более подробно свойства собственных функций s-состояний в центрально-симметричном потенциале $v(\mathbf{r}) = v(r)$ при нулевой энергии. Независящие от угла (с нулевым орбитальным моментом) радиальные функции $\zeta_n(r) = \varphi_n(0;r)$ регулярны и подчиняются уравнению

$$\zeta_n''(r) + \frac{2}{r}\zeta_n'(r) = \lambda_n v(r)\zeta_n(r), \quad n = 1, 2, \ldots, \tag{6}$$

где $\lambda_n = \alpha_n(0) < 0$ — соответствующие собственные значения. При наложении условия

$$r \to \infty: \quad \zeta_n(r)\, r^2 \zeta_n'(r) \to 0 \tag{7}$$

функции $\zeta_m(r)$ и $\zeta_n(r)$ ортогональны с весом $v(r)$, если $\lambda_m \neq \lambda_n$. Поэтому соотношение ортонормированности системы $\{\zeta_n(r)\}$ в отсутствие вырождения имеет вид, аналогичный (3):

$$\int_0^\infty \zeta_n(r)\zeta_m(r)\, v(r)\, r^2\, dr = \delta_{nm}. \tag{8}$$

При $r \gg R$, где R — радиус действия потенциала (см. ниже формулу (24)), в уравнении (6) можно пренебречь правой частью. Решением получившегося уравнения, удовлетворяющим условию (7), является убывающая функция $\zeta_n(r) \propto 1/r$, так что

$$r \to \infty: \quad \zeta_n(r) \approx \frac{Q_n}{r}. \tag{9}$$

Константы («заряды») Q_n, как и λ_n, — параметры, характерные для заданной формы потенциала, т. е. функции $v(r)$.

Собственные значения λ_n определяют критические значения амплитуды потенциала $U_n^0 = (\hbar^2/2m)\lambda_n$, при которых по мере углубления ямы возникают новые уровни с нулевой энергией связи. В трехмерном случае связанное состояние может существовать только в потенциальной яме конечной (не нулевой) глубины. Поэтому все собственные значения λ_n отличны от нуля и, как отмечалось выше, отрицательны.

Умножим уравнение (6) на $r^2\, dr$ и проинтегрируем по r от 0 до ∞. В результате после интегрирования по частям получим, с учетом (9), соотношение

$$\lambda_n \int_0^\infty \zeta_n(r)\, v(r)\, r^2\, dr = -Q_n. \tag{10}$$

Равенство (10) дает формальное определение заряда Q_n из (9) через функцию $\zeta_n(r)$.

Введем нулевую функцию Грина

$$G_0(r,r') = -\left\{\frac{1}{r}\,\theta(r - r') + \frac{1}{r'}\,\theta(r' - r)\right\}, \tag{11}$$

удовлетворяющую уравнению

$$\frac{\partial^2 G_0(r,r')}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\,\frac{\partial G_0(r,r')}{\partial r} = \frac{\delta(r-r')}{r^2}. \qquad (12)$$

В выражении (11) $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$. Функция Грина $G_0(r,r')$ симметрична по своим аргументам: $G_0(r,r') = G_0(r',r)$. С помощью $G_0(r,r')$ дифференциальное уравнение (6) приводим к интегральной форме:

$$\zeta_n(r) = \lambda_n \int\limits_0^\infty G_0(r,r')\zeta_n(r')\,v(r')r'^2\,dr'. \qquad (13)$$

При $r \to \infty$ из (13) следует асимптотика вида (9) с тем же, что и в (10), формальным выражением для Q_n.

3. Как и в случае $\varepsilon \neq 0$, предполагаем, что система собственных функций $\{\zeta_n(r)\}$ — полная. Это дает возможность провести разложение произвольной функции $f(r)$ в следующий ряд:

$$f(r) = \sum_{n=1}^\infty C_n\zeta_n(r), \qquad (14)$$

$$C_n = \int\limits_0^\infty f(r)\zeta_n(r)\,v(r)\,r^2\,dr. \qquad (15)$$

Для сходимости разложения (14), (15) к самой функции $f(r)$ должно выполняться равенство

$$v(r)\sum_{n=1}^\infty \zeta_n(r)\zeta_n(r') = \frac{\delta(r-r')}{r^2}, \qquad (16)$$

являющееся соотношением полноты для системы $\{\zeta_n(r)\}$.

Умножим уравнение (6) на $\lambda^{-1}f(r)\,r^2dr$ и проинтегрируем по всем r. В результате, после двукратного интегрирования по частям, получим

$$C_n = \frac{1}{\lambda_n}\int\limits_0^\infty \zeta_n(r)\left\{r^2 f''(r) + 2r\,f'(r)\right\}\,dr. \qquad (17)$$

При выводе (17) считалось, что проинтегрированные слагаемые равны нулю, что накладывает некоторые ограничения на функцию $f(r)$. Так, для этого при $r \to \infty$, например, достаточно, чтобы функция $f(r)$ убывала как $1/r$.

Для $f(r) = G_0(r,r')$ из (17) с учетом уравнения (12) находим $C_n = \zeta_n(r')/\lambda_n$, так что

$$G_0(r,r') = \sum_n \frac{\zeta_n(r)\zeta_n(r')}{\lambda_n}. \qquad (18)$$

Поскольку $G_0(r,r') = -1/r'$ при $r' \to \infty$, из выражения (18) с учетом асимптотики (9) следует соотношение

$$\sum_n \frac{Q_n}{\lambda_n}\,\zeta_n(r) = -1, \qquad (19)$$

справедливое при всех r. С другой стороны, при $r \to r'$ из (18) следует равенство

$$\sum_n \frac{\left[\zeta_n(r)\right]^2}{\lambda_n} = -\frac{1}{r}, \qquad (20)$$

также справедливое при всех r. Умножив (20) на $v(r)\,r^2\,dr$ и проинтегрировав по всем r, получим правило сумм

$$\frac{1}{R^2}\sum_n \frac{1}{\lambda_n} = -L, \quad L = \frac{1}{R^2}\int\limits_0^\infty v(r)\,r\,dr \qquad (21)$$

с безразмерной константой L и величиной R из (24). При выводе (21) использовано условие нормировки (8) для функции $\zeta_n(r)$.

Умножим (18) на $v(r')\,r'^2dr'$ и проинтегрируем по всем r'. В результате получим следующее разложение:

$$\int\limits_0^\infty G_0(r,r')\,v(r')\,r'^2dr' = -\sum_n \frac{Q_n}{\lambda_n^2}\,\zeta_n(r). \qquad (22)$$

Здесь использовано соотношение (10). При $r \to \infty$ из (22) с учетом (9) находим еще одно правило сумм

$$\sum_n \frac{Q_n^2}{\lambda_n^2} = \frac{1}{3}\,R^3, \qquad (23)$$

где R — радиус действия потенциала, определяемый из равенства

$$R^3 = 3\int\limits_0^\infty v(r)\,r^2 dr. \qquad (24)$$

Наконец, умножив (22) на $v(r)\,r^2 dr$, получим после интегрирования по всем r правило сумм в виде

$$\frac{1}{R^5}\sum_n \frac{Q_n^2}{\lambda_n^3} = I, \qquad (25)$$

где

$$I = \frac{1}{R^5}\int\limits_0^\infty \left[\int\limits_0^\infty G_0(r,r')\,v(r')\,r'^2dr'\right] v(r)\,r^2 dr \qquad (26)$$

— безразмерная константа.

«Полная» функция Грина $G(r,r')$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial^2 G(r,r')}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial G(r,r')}{\partial r}-\alpha\, v(r)\, G(r,r')= =\frac{\delta(r-r')}{r^2}. \quad (27)$$

Разложение $G(r,r')$ в ряд вида (14) приводит к выражению

$$G(r,r')=\sum_n \frac{\zeta_n(r)\zeta_n(r')}{\lambda_n-\alpha}, \quad (28)$$

которое при $\alpha\to 0$ переходит в разложение (18) для $G_0(r,r')$. В соответствии с этим выражение (28) может быть записано в виде

$$G(r,r')=G_0(r,r')+\alpha\sum_n \frac{\zeta(r)\zeta_n(r')}{\lambda_n(\lambda_n-\alpha)}. \quad (29)$$

4. Введенные выше величины имеют следующие порядковые оценки:

$$|\lambda_n|\sim 1/R^2, \quad Q_n\sim 1/\sqrt{R}, \quad L\sim 1, \quad I\sim 1.$$

Однако при $n\gg 1$ оценки для $|\lambda_n|$ и Q_n нуждаются в уточнении. Для исследования s-состояний с нулевой энергией при больших n может быть использовано квазиклассическое приближение, аналогичное стандартному [1]. В то же время метод ВКБ при $\varepsilon=0$ обладает определенной спецификой, так как область «вне ямы» в этом случае отсутствует. Квазиклассическое приближение при $r\to\infty$ становится неприменимым, и в этой области расстояний необходимо использовать точное решение уравнения (6) с асимптотическим выражением для $v(r)$.

Рассмотрим модельный потенциал с $v(0)=1$ и экспоненциальной асимптотикой

$$\gamma r\gg 1: \quad v(r)\approx v_\infty e^{-2\gamma r}, \quad (30)$$

где $v_\infty\sim 1$ и $\gamma\sim 1/R$. Тогда при $n\gg 1$ аналогично [3] получим

$$\zeta_n(r)=\frac{1}{r}\sqrt{\frac{2}{b}}\,\frac{(-1)^n}{\sqrt[4]{v(r)}}\times \times\cos\left\{\sqrt{|\lambda_n|}\int_0^r\sqrt{v(r')}\,dr'-\frac{\pi}{2}\right\} \quad (31)$$

при $\exp(-\gamma r)\gg 1/n$ и

$$\zeta_n(r)=\frac{Q_n}{r}\,J_0\left(\xi_n e^{-\gamma r}\right), \quad \xi_n=\frac{1}{\gamma}\sqrt{|\lambda_n|\,v_\infty} \quad (32)$$

при $\exp(-\gamma r)\ll 1$. Здесь Q_n — то же, что и в (9), $J_0(z)$ — функция Бесселя [7] и величина b из (31) определена в (33).

Из «сшивки» выражений (31) и (32) в области $1/n\ll\exp(-\gamma r)\ll 1$ находим правило квантования

$$\int_0^\infty\sqrt{|\lambda_n|\,v(r)}\,dr=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi$$

и выражение для заряда Q_n. В результате при $n\gg 1$ получаем

$$\lambda_n=-n\left(n+\frac{3}{2}\right)\left(\frac{\pi}{b}\right)^2, \quad b=\int_0^\infty\sqrt{v(r)}\,dr, \quad Q_n=\frac{\pi}{b}\sqrt{\frac{1}{\gamma}\left(n+\frac{3}{4}\right)}. \quad (33)$$

В выражении для λ_n опущен член порядка n^0, так как для его точного определения в правиле квантования необходимо учесть слагаемое порядка $1/n$.

Из (33) для потенциалов с асимптотикой вида (30) следуют уточненные оценки для $|\lambda_n|$ и Q_n при $n\gg 1$:

$$|\lambda_n|\sim\left(\frac{n}{R}\right)^2, \quad Q_n\sim\sqrt{\frac{n}{R}}.$$

В случае потенциала с $v(0)=1$ и асимптотикой

$$\gamma r\gg 1: \quad v(r)\approx\frac{v_\infty}{(\gamma r)^\nu}, \quad \nu>2 \quad (34)$$

при $(\gamma r)^{(\nu-2)/2}\ll n$ для функции $\zeta_n(r)$ справедливо выражение (31). При $(\gamma r)^{(\nu-2)/2}\gg 1$ для функции $\zeta_n(r)$ с учетом асимптотики (34) находим следующее выражение:

$$\zeta_n(r)=-\frac{Q_n}{\sqrt{r}}\,\Gamma\left(\frac{\nu-1}{\nu-2}\right)(2\beta)^\tau\, J_\tau\left(\frac{1}{\beta}\frac{1}{r^{(\nu-2)/2}}\right), \quad \tau=\frac{1}{\nu-2}, \quad \frac{1}{\beta}=\frac{2}{\nu-2}\frac{\sqrt{|\lambda_n|v_\infty}}{\gamma^{\nu/2}}. \quad (35)$$

Из «сшивки» (31) и (35) в диапазоне расстояний $1\ll(\gamma r)^{(\nu-2)/2}\ll n$ получаем

$$\lambda_n=-n\left[n+\frac{4-\nu}{2(\nu-2)}\right]\left(\frac{\pi}{b}\right)^2, \quad Q_n=\sqrt{\frac{\pi}{b}}\,\frac{\gamma^{\nu/4}}{\sqrt[4]{v_\infty}}\left(\frac{1}{2\beta^{\nu/2}}\right)^{1/(\nu-2)}\times \times\left[\Gamma\left(\frac{\nu-1}{\nu-2}\right)\right]^{-1} \quad (36)$$

с b из (33) и β из (35).

3. АМПЛИТУДА s-РАССЕЯНИЯ

1. Рассмотрим рассеяние плоской волны e^{ikz} на центрально-симметричном потенциале. Соответствующая волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ подчиняется уравнению (1) с $\varepsilon = k^2$ и $v(\mathbf{r}) = v(r)$. Для медленных частиц ($kR \ll 1$) существенно только s-рассеяние [1]. В этом случае в области расстояний $r \gg R$, когда в уравнении (1) можно пренебречь правой частью, радиальная волновая функция имеет вид

$$\psi(r) = \frac{\sin kr}{kr} + f_s \frac{e^{ikr}}{r}, \tag{37}$$

где f_s — искомая амплитуда s-рассеяния. При $kr \ll 1$ для волновой функции (37) получаем приближенно

$$R \ll r \ll 1/k: \quad \psi \approx 1 + ikf_s + \frac{f_s}{r}. \tag{38}$$

С другой стороны, при $kr \ll 1$ в уравнении Шредингера может быть опущено слагаемое, содержащее энергию, так что в рассматриваемом случае s-рассеяния оно принимает вид

$$kr \ll 1: \quad \psi''(r) + \frac{2}{r}\psi'(r) = \alpha v(r)\psi(r). \tag{39}$$

При $r \gg R$ в уравнении (39) можно пренебречь правой частью, так что для $\psi(r)$ имеем следующее выражение:

$$R \ll r \ll 1/k: \quad \psi(r) \approx A\left(1 + \frac{B}{r}\right), \tag{40}$$

где константа B не зависит от энергии.

Формулы (38) и (40) справедливы в одном и том же диапазоне расстояний и должны поэтому сшиваться. Из этого условия находим следующее выражение для амплитуды s-рассеяния:

$$f_s(k) = \frac{B}{1 - ikB}. \tag{41}$$

Формула (41) дает функциональную зависимость амплитуды рассеяния от энергии при $kR \ll 1$. Входящая в (41) константа B зависит от вида (формы) потенциала и должна определяться из решения уравнения (39). Соответствующая функция $\psi(r)$ должна быть регулярной при $r = 0$ и иметь асимптотику

$$r \to \infty: \quad \psi(r) \approx 1 + \frac{B}{r}. \tag{42}$$

В (42) несущественная для дальнейшего константа A из (40) положена равной единице. Заметим, что в пределе $k \to 0$ из (41) следует

$$f_s(0) = B, \tag{43}$$

так что величина B совпадает с амплитудой рассеяния при $\varepsilon = 0$.

Введем функцию $\varphi(r)$ согласно

$$\psi(r) = 1 + \varphi(r). \tag{44}$$

Подстановка (44) в (39) приводит к неоднородному уравнению для $\varphi(r)$:

$$\varphi''(r) + \frac{2}{r}\varphi'(r) - \alpha\, v(r)\varphi(r) = \alpha\, v(r). \tag{45}$$

Решение уравнения (45) находится с помощью функции Грина $G(r,r')$ из (27). В результате для функции $\psi(r)$ получаем выражение

$$\psi(r) = 1 + \alpha \int_0^\infty G(r,r')\, v(r')\, r'^2\, dr'. \tag{46}$$

Подставив в (46) разложение (28) для $G(r,r')$, найдем

$$\psi(r) = 1 - \alpha \sum_n \frac{Q_n \zeta_n(r)}{\lambda_n(\lambda_n - \alpha)}. \tag{47}$$

При выводе (47) использовано соотношение (10). При $r \to \infty$ из (47) с учетом (9) для $\psi(r)$ получаем асимптотику вида (42) с явным выражением для коэффициента $B = f_s(0)$.

В результате для амплитуды s-рассеяния при $kR \ll 1$ находим окончательно

$$f_s(k) = \frac{f_s(0)}{1 - ikf_s(0)}, \tag{48}$$

где

$$f_s(0) = -\alpha \sum_n \frac{Q_n^2}{\lambda_n(\lambda_n - \alpha)}. \tag{49}$$

Формула (49) дает точное выражение для амплитуды рассеяния в пределе $k \to 0$.

2. Для потенциала отталкивания ($\alpha > 0$) величина $f_s(0) < 0$, так что длина рассеяния [1] $a = -f_s(0)$ положительна. В то же время для потенциала притяжения ($\alpha < 0$) амплитуда рассеяния $f_s(0)$ может иметь любой знак. При этом с изменением величины α амплитуда f_s проходит ряд «резонансов» при $\alpha = \lambda_n$ ($n = 1, 2, \ldots$). Вблизи такого резонанса амплитуда s-рассеяния принимает вид

$$f_s \approx -\frac{1}{ik + \varkappa_n}, \quad \varkappa_n = \frac{\lambda_n - \alpha}{Q_n^2}. \tag{50}$$

Выражение (50) совпадает с известной формулой для резонансного s-рассеяния медленных частиц [1, § 133]. В то же время для величины $\varkappa_n$, введенной в [1] в качестве феноменологической константы, здесь имеем явное выражение через характерные для данного потенциала параметры.

При $|\alpha| > |\lambda_n|$ (т. е. при $\varkappa_n > 0$) в данном потенциале имеется реальный уровень с энергией $\varepsilon_n = -\varkappa_n^2$. В этом случае, как и должно быть [1], в амплитуде (50) (точнее, в ее аналитическом продолжении в плоскость комплексной энергии) имеется полюс при $\varepsilon = \varepsilon_n$ на физическом листе $\mathrm{Im}\sqrt{\varepsilon} > 0$. Если же $|\alpha| < |\lambda_n|$, то имеется виртуальный уровень ($\varkappa_n < 0$) и полюс в амплитуде рассеяния расположен на нефизическом листе $\mathrm{Im}\sqrt{\varepsilon} < 0$.

С помощью нулевой функции Грина (11) приведем дифференциальное уравнение (39) к интегральной форме:

$$\psi(r) = 1 + \alpha \int\limits_0^\infty G_0(r, r')\psi(r')\, v(r')\, r'^2\, dr'. \qquad (51)$$

Отсюда при $r \to \infty$ для $f_s(0) = B$ следует формальное выражение

$$f_s(0) = -\alpha \int\limits_0^\infty \psi(r)\, v(r)\, r^2\, dr. \qquad (52)$$

Решая уравнение (51) для слабого ($|\alpha|\, R^2 \ll 1$) потенциала итерациями, для амплитуды $f_s(0)$ получим разложение по степеням α:

$$f_s(0) = -\alpha \frac{R^3}{3} - \alpha^2 R^5 I - \ldots \qquad (53)$$

с R из (24) и I из (26). Сравнивая (53) с аналогичным разложением, следующим из общей формулы (49) для $f_s(0)$, приходим к правилам сумм (23) и (25).

4. ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

1. Задачи об упругом s-рассеянии и уровнях энергии связанных s-состояний в трехмерном случае имеют точные решения для ряда потенциалов, в том числе для

$$v(r) = \exp(-2\gamma r). \qquad (54)$$

Кроме того, для этого потенциала может быть определена система собственных функций $\{\zeta_n(r)\}$ с соответствующими собственными значениями λ_n. Это позволяет провести на этом примере проверку общих формул, полученных в предыдущих разделах.

Общее решение уравнения (39) с потенциалом (54) имеет вид

$$\psi(r) = \frac{A}{r}\left\{J_0(\mu e^{-\gamma r}) + D N_0(\mu e^{-\gamma r})\right\}, \quad \mu = \frac{\sqrt{-\alpha}}{\gamma}, \qquad (55)$$

где $N_0(z)$ — функция Неймана, определенная на всей комплексной плоскости z с разрезом вдоль вещественной отрицательной полуоси [8]. Из условия конечности $\psi(r)$ при $r = 0$ следует $D = -J_0(\mu)/N_0(\mu)$. Поскольку при $z \to 0$

$$N_0(z) = \frac{2}{\pi}\left(\ln\frac{z}{2} + \mathbb{C}\right) + \ldots, \qquad (56)$$

где $\mathbb{C} = 0.577\ldots$ — постоянная Эйлера, в пределе $r \to \infty$ из (55) находим

$$f_s(0) = \frac{1}{\gamma}\left\{\frac{\pi}{2}\,\frac{N_0(\mu)}{J_0(\mu)} - \ln\frac{\mu}{2} - \mathbb{C}\right\} \qquad (57)$$

с μ из (55).

Для констант, введенных в разд. 2, в случае потенциала (54) получаем

$$L = \frac{1}{4(R\gamma)^2}, \quad R^3 = \frac{3}{4\gamma^3}, \quad I = -\frac{5}{128}\,\frac{1}{(R\gamma)^5}, \quad b = \frac{1}{\gamma}. \qquad (58)$$

Так как при $z \to 0$

$$\frac{N_0(z)}{J_0(z)} = \frac{2}{\pi}\left(\ln\frac{z}{2} + \mathbb{C}\right) + \frac{2}{\pi}\left(\frac{z}{2}\right)^2 + \frac{5}{4\pi}\left(\frac{z}{2}\right)^4 + \ldots, \qquad (59)$$

для слабого потенциала из (57) следует разложение амплитуды

$$f_s(0) = -\frac{\alpha}{4\gamma^3} + \frac{5}{128}\frac{\alpha^2}{\gamma^5} + \ldots, \qquad (60)$$

согласующееся, с учетом (58), с (53).

2. Собственные функции $\zeta_n(r)$ и собственные значения λ_n в данном случае имеют вид

$$\zeta_n(r) = \frac{Q_n}{r}\, J_0(\mu_n e^{-\gamma r}), \quad \lambda_n = -\gamma^2\mu_n^2, \quad Q_n = (-1)^{n+1}\frac{\sqrt{2\gamma}}{J_0'(\mu_n)}, \qquad (61)$$

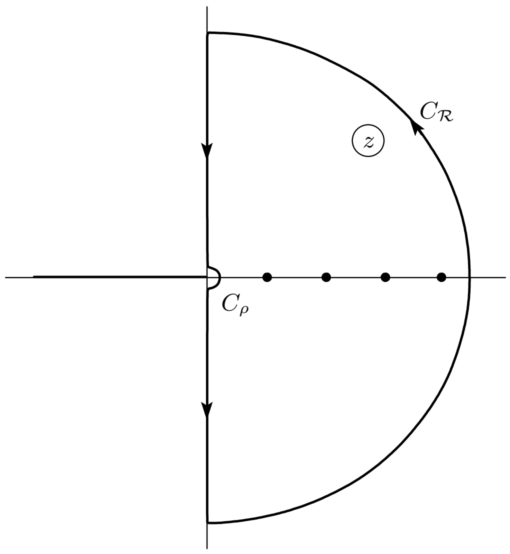
где $\mu_n > 0$ — нули функции Бесселя:

$$J_0(\mu_n) = 0. \qquad (62)$$

Из асимптотики функции $J_0(z)$ при $z \to \infty$ найдем μ_n при больших n:

$$n \gg 1: \quad \mu_n = \left(n + \frac{3}{4}\right)\pi. \qquad (63)$$

В результате для λ_n и Q_n из (61) следуют асимптотические выражения (33) с $b = 1/\gamma$.



Подстановка μ_n и Q_n из (61) в общую формулу (49) дает

$$f_s(0) = \frac{2\mu^2}{\gamma} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{[J_0'(\mu_n)]^2 \mu_n^2 (\mu_n^2 - \mu^2)} \tag{64}$$

с μ из (55). Из вронскиана [8]

$$J_0(z)N_0'(z) - J_0'(z)N_0(z) = \frac{2}{\pi z} \tag{65}$$

выразим $J_0'(z)$ при $z = \mu_n$ через $N_0(\mu_n)$ и подставим в (64). В результате $f_s(0)$ примет вид

$$f_s(0) = -\frac{\pi\mu^2}{\gamma} S, \quad S = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_0(\mu_n)}{J_0'(\mu_n)} \frac{1}{\mu_n(\mu_n^2 - \mu^2)}. \tag{66}$$

Рассмотрим интеграл

$$T = \oint \frac{N_0(z)}{J_0(z)} \frac{1}{z(z^2 - \mu^2)} \frac{dz}{2\pi i}, \tag{67}$$

взятый по замкнутому контуру, изображенному на рисунке. С одной стороны, этот интеграл равен сумме вычетов в полюсах подынтегрального выражения:

$$T = S + \frac{1}{2\mu^2} \frac{N_0(\mu)}{J_0(\mu)}. \tag{68}$$

С другой, — сумме интегралов, взятых по отдельным частям контура:

$$T = \int\limits_{C_{\mathbb{R}}} + \int\limits_{C_\rho} + \int\limits_{i\infty}^{i\rho} + \int\limits_{-i\rho}^{-i\infty}. \tag{69}$$

Первый интеграл в (69), взятый по полуокружности радиуса $\mathcal{R} \to \infty$, в этом пределе обращается в нуль. Второй интеграл берется по полуокружности радиуса $\rho \to 0$ с центром в точке $z = 0$. Используя разложение (59), найдем

$$\int\limits_{C_\rho} = \frac{1}{\pi\mu^2} \left(\ln \frac{\rho}{2} + \mathbb{C} \right). \tag{70}$$

Третий и четвертый интегралы в (69) берутся по мнимой оси $z = iy$. Согласно [8],

$$\frac{N_0(ze^{\pm i\pi/2})}{J_0(ze^{\pm i\pi/2})} = \pm i - \frac{2}{\pi} \frac{K_0(z)}{I_0(z)}, \tag{71}$$

где $I_0(z)$ — модифицированная функция Бесселя первого рода и $K_0(z)$ — функция Макдональда, так что

$$\int\limits_{i\infty}^{i\rho} + \int\limits_{-i\rho}^{-i\infty} = \frac{1}{\pi} \int\limits_{\rho}^{\infty} \frac{dy}{y(y^2 + \mu^2)} = \frac{1}{\pi\mu^2} \ln \frac{\mu}{\rho}. \tag{72}$$

В результате, суммируя вклады отдельных интегралов, для T из (69) получим

$$T = \frac{1}{\pi\mu^2} \left(\ln \frac{\mu}{2} + \mathbb{C} \right). \tag{73}$$

Приравнивая (68) и (73), найдем величину S из (66):

$$S = -\frac{1}{2\mu^2} \frac{N_0(\mu)}{J_0(\mu)} + \frac{1}{\pi\mu^2} \left(\ln \frac{\mu}{2} + \mathbb{C} \right). \tag{74}$$

Подстановка (74) в (66) приводит к выражению (57) для $f_s(0)$. Аналогичным образом проверяются различные правила сумм, выведенные в разд. 2.

Для потенциалов отталкивания ($\alpha > 0$) для амплитуды рассеяния $f_s(0)$ из (57) следует выражение

$$f_s(0) = -\frac{1}{\gamma} \left\{ \frac{K_0(\widetilde{\mu})}{I_0(\widetilde{\mu})} + \ln \frac{\widetilde{\mu}}{2} + \mathbb{C} \right\}, \quad \widetilde{\mu} = \frac{\sqrt{\alpha}}{\gamma}. \tag{75}$$

При выводе (75) использовано равенство (71).

В заключение заметим, что по системе функций $\{J_0(\mu_n \xi)\}$ при $0 \leqslant \xi \leqslant 1$ проводится так называемое разложение Фурье–Бесселя [8]. В силу сходимости такого разложения выполняется соотношение

$$2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\mu_n \xi) J_0(\mu_n \xi')}{[J_0'(\mu_n)]^2} = \frac{\delta(\xi - \xi')}{\xi}. \tag{76}$$

Подстановка $\xi = e^{-\gamma r}$ в (76) приводит к равенству

$$e^{-2\gamma r} \sum_{n=1}^{\infty} \zeta_n(r) \zeta_n(r') = \frac{\delta(r - r')}{r^2}, \tag{77}$$

являющемуся соотношением полноты (16) для системы собственных функций $\{\zeta_n(r)\}$ из (61) с $v(r) = \exp(-2\gamma r)$.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведем для справок соответствующие результаты еще для трех потенциалов, допускающих точное решение рассмотренной задачи.

1. Для потенциала

$$v(r) = \frac{1}{(1+\gamma^2 r^2)^2} \tag{1.1}$$

собственные функции и собственные значения имеют вид

$$\begin{gathered} \zeta_n(r) = \frac{A_n}{r}\sqrt{1+\gamma^2 r^2}\,\sin\{2n\,\mathrm{arctg}(\gamma r)\}, \\ A_n = (-1)^{n+1}\sqrt{\frac{4\gamma}{\pi}}, \quad Q_n = 4n\sqrt{\frac{\gamma}{\pi}}, \\ \lambda_n = -\gamma^2\left[(2n)^2 - 1\right], \quad n = 1, 2, \ldots \end{gathered} \tag{1.2}$$

Амплитуда рассеяния при $\varepsilon = 0$ равна

$$f_s(0) = -\frac{\mu}{\gamma}\,\mathrm{ctg}\,\frac{\mu\pi}{2}, \quad \mu = \sqrt{1-\frac{\alpha}{\gamma^2}}. \tag{1.3}$$

Для констант, введенных в разд. 2, получаем

$$\begin{gathered} R^3 = \frac{3\pi}{4\gamma^3}, \quad L = \frac{1}{2(R\gamma)^2}, \\ I = -\frac{\pi}{16}\frac{1}{(R\gamma)^5}, \quad b = \frac{\pi}{2\gamma}. \end{gathered} \tag{1.4}$$

При $n \gg 1$ выражения для λ_n и Q_n согласуются, с учетом $b = \pi/2\gamma$, с (36) при $\nu = 4$ и $v_\infty = 1$.

2. Для потенциала

$$v(r) = \theta(R - r), \tag{2.1}$$

где $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$, для $r \le R$ имеем

$$\zeta_n^{(i)}(r) = (-1)^n\sqrt{\frac{2}{R}}\frac{\sin\mu_n r}{r}, \quad \mu_n = \sqrt{-\lambda_n}, \tag{2.2}$$

а для $r \ge R$ —

$$\zeta_n^{(e)}(r) = \frac{Q_n}{r}, \quad Q_n = \sqrt{\frac{2}{R}}. \tag{2.3}$$

Из граничных условий следует $\cos(\mu_n R) = 0$, так что

$$\begin{gathered} \mu_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{R}, \\ \lambda_n = -\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\left(\frac{\pi}{R}\right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \end{gathered} \tag{2.4}$$

Амплитуда рассеяния при $\varepsilon = 0$ равна

$$f_s(0) = -R\left\{1 - \frac{\mathrm{tg}\,\mu R}{\mu R}\right\}, \quad \mu = \sqrt{-\alpha}. \tag{2.5}$$

Для констант получаем

$$L = \frac{1}{2}, \quad I = -\frac{2}{15}. \tag{2.6}$$

Радиус действия потенциала и константа b равны R.

Отметим, что выражения (1.3), (2.5) и (57) из текста согласуются с соответствующими результатами задач к § 132 из [1] и задачи № 13.31 из [2].

3. Для потенциала

$$v(r) = \frac{1}{\mathrm{ch}^2\,\gamma r} \tag{3.1}$$

имеем

$$\begin{gathered} \zeta_n(r) = \frac{Q_n}{r}\,P_{2n+1}(\mathrm{th}\,\gamma r), \\ Q_n = 2\sqrt{\gamma\left(n+\frac{3}{4}\right)}, \\ \lambda_n = -2\gamma^2(n+1)(2n+1), \\ n = 0, 1, 2, \ldots, \end{gathered} \tag{3.2}$$

где $P_n(x)$ — полиномы Лежандра. Для констант получаем

$$\begin{gathered} \frac{R^3}{3} = \frac{\pi}{12}\frac{1}{\gamma^3}, \quad L = \frac{\ln 2}{(\gamma R)^2}, \\ I \approx -\frac{0.3796}{(\gamma R)^5}, \quad b = \frac{\pi}{2}\frac{1}{\gamma}. \end{gathered} \tag{3.3}$$

Здесь константа I определена численным методом. Отметим, что величины λ_n и Q_n при $n \gg 1$ согласуются, с учетом $b = \pi/2\gamma$, с асимптотическими оценками (33).

Регулярное при $r = 0$ решение уравнения (39) с потенциалом (3.1) имеет вид

$$\begin{gathered} \psi(r) = \frac{A}{r}\left\{P_\nu(\xi) + \frac{2}{\pi}\,\mathrm{ctg}\,\frac{\nu\pi}{2}\,Q_\nu(\xi)\right\}, \\ \xi = \mathrm{th}\,\gamma r. \end{gathered} \tag{3.4}$$

Здесь $P_\nu(z)$ и $Q_\nu(z)$ — функции Лежандра [9] с индексом

$$\nu = \frac{1}{2}\left(\sqrt{1-\frac{4\alpha}{\gamma^2}} - 1\right). \tag{3.5}$$

При $r \to \infty$ имеем $\xi \to 1 - 2e^{-2\gamma r}$. В этом случае, согласно [9],

$$\begin{gathered} \xi \to 1: \quad P_\nu(\xi) \to 1, \\ Q_\nu(\xi) \to -\frac{1}{2}\ln\frac{1-\xi}{2} - \mathbb{C} - \psi(1+\nu), \end{gathered} \tag{3.6}$$

где $\psi(z)$ — логарифмическая производная гамма-функции, так что из (3.4) находим

$$f_s(0) = \frac{1}{\gamma}\left\{\frac{\pi}{2}\,\mathrm{tg}\,\frac{\nu\pi}{2} - \mathbb{C} - \psi(1+\nu)\right\}. \qquad (3.7)$$

Согласно [7, 9] имеем

$$z \to 0: \quad \psi(1+z) = -\mathbb{C} + z\zeta(2) - z^2\zeta(3) + \ldots, \qquad (3.8)$$

где $\zeta(n)$ — дзета-функция Римана:

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(3) = 1.2020569\ldots \qquad (3.9)$$

Разложение (3.5) и (3.7) по степеням α до α^2 позволяет найти аналитическое выражение для константы I:

$$I = -\left\{\zeta(3) - \frac{\pi^2}{12}\right\}\frac{1}{(\gamma R)^5}, \qquad (3.10)$$

согласующееся с результатом численного счета из (3.4).

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
2. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган, *Задачи по квантовой механике*, Наука, Москва (1992).
3. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **126**, 986 (2004).
4. S. Weinberg, Phys. Rev. **131**, 440 (1963).
5. И. М. Народецкий, ЯФ **9**, 1086 (1969).
6. С. И. Манаенков, ТМФ **12**, 397 (1972).
7. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1962).
8. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2, Наука, Москва (1974).
9. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).