ЖЭТФ, 2016, том 150, вып. 2 (8), стр. 288–292

ПРИБЛИЖЕНИЕ ПАЙСА ДЛЯ РАССЕИВАЮЩИХСЯ И РЕЗОНАНСНЫХ МЕДЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

Ю. М. Брук [*], ***А. Н. Волощук***

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 февраля 2016 г.

Обсуждается метод вычисления парциальных фаз рассеяния для частиц с ненулевыми моментами и для эффективно короткодействующих потенциалов. Построены решения уравнений Пайса для медленных частиц. Рассмотрена обратная задача об отыскании в резонансной ситуации связи параметров потенциалов и энергий рассеивающихся частиц.

DOI: 10.7868/S0044451016080095

Задача вычисления парциальных фаз рассеяния для частиц с ненулевыми моментами по-прежнему остается важной в квантовой механике, особенно в тех случаях, когда борновское приближение не может быть применено. Борновское приближение годится тогда, когда парциальные фазы малы по сравнению с единицей, а причиной этого является то, что борновское приближение по существу получается как следствие теории возмущений.

В интересующих нас резонансных случаях рассеяния фазы уже не малы и удобно пользоваться методом Пайса, который был предложен на основе вариационной процедуры еще в 1949 г. [1].

Уравнение Пайса является интегрофункциональным уравнением, связывающим для данного момента l параметры потенциала рассеяния $U(r)$, энергию рассеиваемой частицы k^2 и фазу рассеяния δ_l.

Ниже мы пользуемся системой единиц, в которой принято, что постоянная Планка $\hbar$ и удвоенная масса частицы $2m$ равны единице.

Само уравнение Пайса имеет вид

$$\frac{2l+1-\dfrac{2\delta_l}{\pi}}{2l+1-\dfrac{4\delta_l}{\pi}}\,\delta_l = -\frac{\pi}{2}\int\limits_0^\infty U(r) J^2_{l+1/2-2\delta_l/\pi}(kr) r\,dr. \quad (1)$$

В правой части уравнения (1) под интегралом стоит квадрат функции Бесселя с индексом $l+1/2-2\delta_l/\pi$. Мы обсудим сначала простой способ его вывода, принадлежащий Титцу [2]. Подобная процедура часто используется в квантовой механике и для наших дальнейших рассуждений, кажется нам, весьма удобной. Вариационная процедура Пайса описана также в [3].

Напишем три уравнения Шредингера:

$$y'' + \left[k^2 - U - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] y = 0, \quad (2a)$$

$$u'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u = 0, \quad (2b)$$

$$v'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1) - b^2}{r^2}\right] v = 0. \quad (2c)$$

Точные решения уравнений (2b) и (2c) известны:

$$u = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{l+1/2}(kr), \quad (3a)$$

$$v = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{\sqrt{(l+1/2)^2-b^2}}(kr). \quad (3b)$$

Соответствующие граничные условия:

$$u(0) = 0, \quad u(\infty) \Rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad (4a)$$

$$v(0) = 0, \quad v(\infty) \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - b^2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (4b)$$

Точное решение уравнения (2a) удовлетворяет граничным условиям

$$y(0) = 0, \quad y(\infty) \Rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right). \quad (4c)$$

[*] E-mail: yubruk@gmail.com

Если теперь потребуем, чтобы решение v уравнения (2c) удовлетворяло тем же граничным условиям (4c), что и точное решение (2a), то тогда постоянная b^2 должна быть

$$b^2 = \frac{4}{\pi^2}\left[-\delta_l^2 + \pi\left(l+\frac{1}{2}\right)\delta_l\right]. \tag{5}$$

Следовательно,

$$v = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{l+1/2-2\delta_l/\pi}(kr). \tag{6}$$

Умножаем уравнение (2a) на u, а (2b) на y, вычитаем одно равенство из другого и проинтегрируем от нуля до бесконечности, учитывая при этом граничные условия (4). После этого в интеграл, содержащий U, вместо точного решения y подставляется решение u. Описанная процедура дает известное борновское приближение:

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}\int\limits_0^\infty U(r)J_{l+1/2}^2(kr)r\,dr. \tag{7}$$

Применим теперь ту же процедуру к уравнениям (2b) и (2c), при этом возникает интеграл Каптейна [4]:

$$\int\limits_0^\infty J_\mu(\alpha t)J_\nu(\alpha t)\frac{dt}{t} = \\ = \begin{cases} \dfrac{2}{\pi}\,\dfrac{\sin[\pi(\nu-\mu)/2]}{\nu^2-\mu^2}, & \mu\neq\nu, \\ \dfrac{1}{2\mu}, & \mu=\nu. \end{cases} \tag{8}$$

Наконец, применим эту процедуру к уравнениям (2a) и (2c). Решение для v определяется выражением (6).

Учитывая (8), получим формулу Пайса (1).

Поучительно сравнить приближения Борна и Пайса (формулы (7) и (1)). При $\delta\to 0$ уравнение (1) переходит в (7).

При получении формулы (1) из вариационной процедуры Пайса предполагается по существу начальный выбор пробной вариационной функции в виде функции Бесселя с произвольным индексом. Для борновского случая такой функцией является функция Бесселя с полуцелым индексом. Понятно поэтому, что формула Пайса (1) имеет при соответствующем последующем выборе индекса более широкую область применимости, чем формула (7). В частности, выражение (1) может применяться и тогда, когда борновское приближение несправедливо. Другими словами, применяя (1), мы выходим за рамки борновского приближения. Более того, как мы увидим дальше, пайсовское приближение позволяет анализировать ситуации, близкие к резонансным. Численные расчеты подтверждают, что с помощью уравнения (1) фазы рассеяния вычисляются точнее, чем на основе (7) даже и для небольших фаз.

Приближение Пайса не применимо для случая $l=0$. Поэтому s-рассеяние нужно рассматривать отдельно. Но этот случай гораздо полнее описан в стандартных учебниках, и мы не будем его обсуждать в нашем тексте.

Кроме того, мы ограничимся случаем эффективно короткодействующих потенциалов и малых энергий, когда $kr \ll 1$. При этом решение уравнения Пайса можно реально построить.

Прежде чем переходить к рассуждениям с конкретными потенциалами, напомним, что сечение рассеяния записывается как обычно:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{9}$$

Поэтому резонансные ситуации соответствуют значениям $\delta_l = \pi/2 \pmod{\pi}$, а значения $\delta_l = \pi n$ (n — целые числа) приводят к пропуску в сумме (9) соответствующих слагаемых.

Для описания именно рассеяния на потенциалах притяжения должны быть выполнены условия

$$l(l+1) - b^2 > 0, \tag{10}$$

где b^2 определяется формулой (5), а условие сходимости интеграла в (1) — положительность индекса функции Бесселя:

$$\delta_l < \frac{\pi}{2}\left(l+\frac{1}{2}\right). \tag{11}$$

Для всех $U<0$, как обычно, фазы $\delta_l > 0$.

Пусть теперь $l = 1, 2, 3, \ldots$ Найдем сначала корни квадратных трехчленов $l(l+1)-b^2$. Соответственно они равны

$$\frac{\pi}{2} \text{ и } \pi \text{ для } l=1; \quad \pi \text{ и } \frac{3\pi}{2} \text{ для } l=2; \\ \frac{3\pi}{2} \text{ и } 2\pi \text{ для } l=3;\ldots$$

Совместное решение (10) и (11) приводит к односторонним ограничениям:

$$\delta_l \leqslant \frac{\pi}{2} \text{ (при } l=1); \quad \delta_l \leqslant \pi \text{ (при } l=2); \\ \delta_l \leqslant \frac{3\pi}{2} \text{ (при } l=3);\ldots \tag{12}$$

Нас будут интересовать дальше резонансные случаи ($\delta_l^{res} = \pi/2, 3\pi/2, \ldots$) и случаи, когда δ_l кратны π. Последний случай назовем парциальными эффектами (или фазами) Рамзауэра (ПЭР). Слагаемые с такими фазами, как уже было сказано, исключаются из ряда (9).

Разумеется, на всех разрешенных полуосях (12) допустимы и другие фазы, отличные от уже перечисленных. Разные значения фаз получаются при варьировании параметров потенциалов и/или энергий рассеивающихся частиц. Возвращаясь к (12), мы будем обсуждать ниже случаи, когда возможны фазы

$$\frac{\pi}{2} \text{ для } l = 1; \; \frac{\pi}{2} \text{ и } \pi \text{ для } l = 2; \; \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2} \text{ для } l = 3.$$

Задавая в принципе любую допустимую фазу при каждом l, можно находить из (1) связь между параметрами потенциала $U(r)$ и энергией k^2 рассеивающейся частицы.

Дальше будем обсуждать резонансные ситуации для конкретных потенциалов и частиц с малыми энергиями.

Уравнение (1) в общем виде, при произвольных энергиях и потенциалах, конечно, не решается аналитически. Но для малых энергий (точнее, при $ka \ll 1$, здесь a — эффективный радиус потенциала) получаются вполне удовлетворительные приближенные решения. Такая программа частично реализована в работах [3, 5].

Несколько модернизируем технику вычислений, подставляя в (1) асимптотику функции Бесселя при $kr \ll 1$,

$$J_\mu^2(kr) \simeq \left(\frac{kr}{2}\right)^{2\mu} \frac{1}{\Gamma^2(\mu+1)}. \qquad (13)$$

Здесь $\mu = l + 1/2 - 2\delta_l/\pi$. Существенно наличие фазы δ_l в индексе функции Бесселя.

Заметим еще, что везде при вычислениях мы пользуемся обычным определением гамма-функции

$$\Gamma(z) = \int\limits_0^\infty t^{z-1} e^{-t}\, dt, \quad \operatorname{Re} z > 0.$$

Рассмотрим некоторые примеры. В атомной физике рассеяние нейтрона на атомном ядре может быть описано потенциалами [6]

а) прямоугольной ямы:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ 0, & r \geqslant R \end{cases} \qquad (14)$$

для тяжелых ядер с массовыми числами A порядка 200;

б) гармонического осциллятора:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 \left(1 - \dfrac{r^2}{R^2}\right), & r < R, \\ 0, & r \geqslant R \end{cases} \qquad (15)$$

для легких ядер с $A \simeq 10$. По аналогии с оптикой такой потенциал можно называть также потенциалом типа Лунеберга;

в) Вудса – Саксона:

$$U(r) = -\frac{U_0}{1 + e^{(r-R)/a}}. \qquad (16)$$

Этот потенциал точнее описывает рассеяние на атомных ядрах, чем предыдущие два. В написанных формулах: R — радиус ядра, a в (16) — ширина размытия потенциала.

Вычисления интегралов в (1) с учетом (13) в общем не представляет принципиальных затруднений, но довольно громоздки из-за манипулирования с асимптотикой бесселевых функций и с гамма-функциями.

Удобно ввести еще параметр $s = l + 1 - 2\delta_l/\pi$, тогда получаются следующие результаты:

для потенциала (14)

$$(U_0 R^2) \left(\frac{kR}{2}\right)^{2s-1} = \frac{(l+s)(l+1-s)(2s+1)\Gamma^2(s+1/2)}{2s-1}; \qquad (17)$$

для потенциала (15)

$$(U_0 R^2) \left(\frac{kR}{2}\right)^{2s-1} = \frac{(l+s)(l+1-s)(2s+1)(2s+3)\Gamma^2(s+1/2)}{2s-1}; \qquad (18)$$

для потенциала (16) вычисления немного сложнее, они приведены в [3], а ответ таков:

$$(U_0 a^2) \left(\frac{kR}{2}\right)^{2s-1} = \frac{(l+s)(l+1-s)\Gamma^2(s+1/2)}{2s-1} \times \\ \times \left[\frac{(R/a)^2}{2s+1} + \frac{\pi^2 s}{3} + \frac{7\pi^4}{360} 2s(2s-1)(2s-2) \times \\ \times \left(\frac{a}{R}\right)^2\right]^{-1}. \qquad (19)$$

Заменяя $U_0 a^2 = U_0 R^2 (a/R)^2$ и вычисляя предел при $a/R \ll 1$, из формулы (19) получим формулу (17).

Формулы (17)–(19) позволяют вычислять для конкретных l, параметров потенциалов, и энергии k^2

частицы значения δ_l. Некоторая логарифмическая процедура для таких расчетов изложена в [3, 5].

Общая идея здесь такова. Структуры получающихся трансцендентных уравнений (после вычисления интегралов в (1)) очень похожи. В правой части стоит некоторая функция аргумента s с параметром l, слева же с точностью до константы выражение типа $(U_0R^2)\ (kR)^{2s-1}$. После численного решения таких трансцендентных уравнений из формулы $s = l + 1 - 2\delta_l/\pi$ вычисляется фаза δ_l.

Если же интересоваться резонансами или парциальными эффектами Рамзауэра, то следует подставлять в формулы (17)–(19) величины l, s и фазы δ_l и прямо находить условия (связь параметров и энергий) для искомых случаев.

Подобная же процедура, как теперь понятно, может быть проделана для других потенциалов. Среди них потенциалы Юкавы, Хюльтена, Томаса – Ферми, Букингема. Мы приведем дальше еще один пример, другие можно найти в [3].

Существуют и немногочисленные другие результаты — аналитические и численные, позволяющие делать некоторые сравнения [7, 8]. Они показывают эффективность и полезность уравнения Пайса (1). Результаты фазовых расчетов при малых энергиях ранее обсуждались в работе [5]. Пайсовская идея была, к сожалению, почти забыта, что безусловно несправедливо. Сама формула Пайса (1) упоминалась, впрочем, в книгах [9, 10].

Обсудим теперь рассеяние при малых энергиях на потенциале Хюльтена. Удобно опять подставить в (1) асимптотику функции Бесселя при малых kr и потенциал Хюльтена

$$U = -U_0 \frac{e^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}}. \tag{20}$$

Далее здесь естественно для получившегося интеграла воспользоваться преобразованием Меллина, после чего в результате несложных вычислений получится формула

$$\frac{2l + 1 - 2\delta_l/\pi}{2l + 1 - 4\delta_l/\pi}\, \delta_l = \frac{\pi}{2}\, (U_0 a^2) \left(\frac{ka}{2}\right)^{2\mu} \times \\ \times \frac{\Gamma(2\mu + 2)\zeta(2\mu + 2)}{[\Gamma(\mu + 1)]^2}. \tag{21}$$

Здесь опять $\mu = l + 1/2 - 2\delta_l/\pi$, ζ — дзета-функция.

При $l = 1$ возможен единственный резонанс $\delta_1 = \pi/2$; при $l = 2$ может быть резонанс $\pi/2$ и ПЭР-фаза π; при $l = 3$ будем подставлять резонансные фазы $\pi/2$, $3\pi/2$ и ПЭР-фазу π и т. д.

Дальнейшее вычисление условий резонансов и ПЭР элементарно, сводка результатов приводится в конце статьи. Надо, конечно, не забывать о том, что в конечном счете наши вычисления надо дополнять информацией о рассеянии с $l = 0$.

После вычисления парциальных фаз уже можно оценить (вычислить) вклад парциальных волн в целом, и резонансов в том числе, в сечения рассеяния для элементарных процессов. Для оценок можно рассматривать вклады в сечение только от резонансов, если они существуют в конкретных задачах.

Для многих задач обсуждаемая методика вычисления фаз и сечений более удобна, чем прямые и трудно контролируемые численные расчеты (решение уравнения Шредингера). Кроме того, по существу здесь решается и обратная задача — находятся несложные формулы, определяющие связи параметров потенциалов и энергий, для которых реализуются резонансы и фазы ПЭР в парциальных волнах.

Ниже выпишем результаты вычислений для резонансов и ПЭР-фаз. При этом для каждого потенциала мы ограничиваемся только первыми парциальными вкладами. При всех вычислениях используются введенные ранее обозначения

$$s = l + 1 - \frac{2\delta_l}{\pi}, \quad \mu = l + \frac{1}{2} - \frac{2\delta_l}{\pi}.$$

Перечислим полученные ответы.

Для формулы (17) получается следующий набор ответов:

$$\begin{array}{lllll}
1) & l = 1, & \delta_1 = \pi/2, & s = 1, & (U_0R^2)(kR) = 3\pi, \\
2) & l = 2, & \delta_2 = \pi/2, & s = 2, & (U_0R^2)(kR)^3 = 30\pi, \\
3) & l = 2, & \delta_2 = \pi, & s = 1, & (U_0R^2)(kR) = 9\pi, \\
4) & l = 3, & \delta_3 = \pi/2, & s = 3, & (U_0R^2)(kR)^5 = 945\pi, \\
5) & l = 3, & \delta_3 = \pi, & s = 2, & (U_0R^2)(kR)^3 = 75\pi, \\
6) & l = 3, & \delta_3 = 3\pi/2, & s = 1, & (U_0R^2)(kR) = 18\pi.
\end{array}$$

Условимся, что нумерация случаев от 1 до 6 сохраняется ниже.

Заметим, что формула (18) отличается от (17) дополнительным множителем $2s + 3$ в правой части. Поэтому, чтобы получить ответы для (18), нужно умножить в каждой приведенной выше строке правую часть последнего равенства на соответствующую величину $2s + 3$.

Теперь рассмотрим формулу (19). В ней возникает дополнительный множитель (в квадратных скобках). Появляется он из-за существования параметра a/R. При $a/R \to 0$, как уже отмечалось выше, формула (19) перешла бы в (17). Вынесем за квадратные скобки в (19) выражение $(R/a)^2/(2s + 1)$, а последним слагаемым в этих скобках вообще пренебрежем, оно будет порядка $(a/R)^4 \ll 1$. Таким образом, в квадратных скобках останется

$$\left[1 + \frac{\pi^2 s}{3}(2s+1)\left(\frac{a}{R}\right)^2\right].$$

Перенесем этот остаток в числитель левой части равенств в каждой из шести строк набора ответов для формулы (17). Справа же останутся прежние числа. Это и будут ответы для формулы (19).

Выпишем окончательный набор ответов для потенциала Хюльтена:

$$1)\quad l=1,\quad \delta_1=\frac{\pi}{2},\qquad (U_0a^2)(ka)=\frac{\pi}{2\zeta(3)},$$

$$2)\quad l=2,\quad \delta_2=\frac{\pi}{2},\qquad (U_0a^2)(ka)^3=\frac{\pi}{4\zeta(5)},$$

$$3)\quad l=2,\quad \delta_2=\pi,\qquad (U_0a^2)(ka)=\frac{3\pi}{2\zeta(3)},$$

$$4)\quad l=3,\quad \delta_3=\frac{\pi}{2},\qquad (U_0a^2)(ka)^5=\frac{3\pi}{16\zeta(7)},$$

$$5)\quad l=3,\quad \delta_3=\pi,\qquad (U_0a^2)(ka)^3=\frac{5\pi}{8\zeta(5)},$$

$$6)\quad l=3,\quad \delta_3=\frac{3\pi}{2},\qquad (U_0a^2)(ka)=\frac{3\pi}{\zeta(3)}.$$

Значения дзета-функции Римана:

$$\zeta(3)=1.202,\quad \zeta(5)=1.0369,\quad \zeta(7)=1.00835.$$

Аналогичные результаты получаются и для других потенциалов и для парциальных слагаемых с $l>3$.

Существенно, что с помощью подобных рассуждений производится полная классификация резонансов и парциальных фаз Рамзауэра для медленных частиц при всех l.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Pais, Proc. Cambr. Phil. Soc. **42**, 45 (1946).

2. Т. Титц, ЖЭТФ **37**, 294 (1959).

3. Ю. М. Брук, А. Н. Волощук, УФН **182**, 173 (2012).

4. Г. Ватсон, *Теория бесселевых функций*, Изд-во иностр. литер., Москва (1949).

5. Ю. М. Брук, ТМФ **66**, 392 (1986).

6. Б. С. Ишханов, И. М. Капитонов, Н. П. Юдин, *Частицы и атомные ядра*, ЛКИ, Москва (2007).

7. W. J. Romo and S. R. Valluri, J. Phys. B **23**, 4223 (1990).

8. W. J. Romo and S. R. Valluri, Phys. Scripta **71**, 572 (2005).

9. Н. Мотт, И. Снеддон, *Волновая механика и ее применения*, Наука, Москва (1966).

10. Т. Ю. Ву, Т. Омура, *Квантовая теория рассеяния*, Наука, Москва (1969).