ЖЭТФ, 2018, том 154, вып. 3 (9), стр. 543–556 © 2018

# К ТЕОРИИ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЧАСТИЦ

*Б. Я. Балагуров*[*]

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

Поступила в редакцию 25 апреля 2018 г.

Задача об упругом рассеянии частиц рассмотрена в рамках метода квантования потенциала. Исследованы свойства собственных функций $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и собственных значений $\alpha_\nu^{(+)}$ этого метода для состояний с положительной энергией (область непрерывного спектра). В предположении полноты системы $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ дано решение поставленной задачи путем разложения искомой волновой функции по этой системе. Предлагаемый подход воспроизводит известные результаты во всех рассмотренных предельных случаях, давая, в то же время, более детальное описание амплитуды рассеяния, чем стандартная фазовая теория.

**DOI:** 10.1134/S0044451018090092

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Теория упругого рассеяния частиц, имеющая многочисленные применения, в достаточной степени развита и является важной составляющей квантовой механики. Основные результаты этой теории представлены в книгах [1–3] и других монографиях. Для амплитуды упругого рассеяния — центральной характеристики этого процесса — установлены некоторые общие свойства: соотношение унитарности, связь полюсов амплитуды с уровнями энергии в потенциале притяжения и т. д. В ряде предельных случаев найден явный вид амплитуды: при рассеянии на «слабом» потенциале (борновское приближение), при резонансном рассеянии частиц малой энергии и т. п.

Однако, несмотря на известную завершенность теории упругого рассеяния, представляет определенный интерес рассмотрение соответствующей задачи с помощью альтернативного стандартному метода, когда квантуется потенциальная энергия. Такой подход позволяет по-новому взглянуть на обсуждаемую проблему и получить дополнительную информацию об амплитуде рассеяния. Подобного типа способ квантования впервые, по-видимому, был применен в статье [4]. В этой работе потенциалу $U(\mathbf{r})$ в уравнении Шрёдингера приписывался некоторый множитель: $U(\mathbf{r}) \to \lambda U(\mathbf{r})$. В полученном таким образом модифицированном уравнении в качестве объекта квантования выбиралась константа $\lambda$. Этот формальный прием использовался при решении некоторых задач для потенциала в виде трехмерного кулона.

В работах [5, 6] был предложен подход, не требующий введения вспомогательных величин в уравнение Шредингера. Для рассмотренных в работах [5,6] отрицательных энергий (область связанных состояний) в качестве объекта квантования выбиралась глубина потенциальной ямы. В этом случае сама энергия $E$ выполняла роль параметра. При таком подходе как собственные значения $\alpha_\nu$, так и собственные функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ вещественны и имеют реальный физический смысл. Дискретному спектру величин $\alpha_\nu$ соответствует бесконечный набор глубин потенциальных ям, в которых имеются связанные состояния с одним и тем же уровнем энергии $E < 0$. Волновые функции таких состояний при особом (с «весом») условии нормировки образуют систему собственных функций $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$. Применение этого метода несколько упрощает решение рассмотренных в [5,6] задач, так как при этом отпадает необходимость в привлечении системы волновых функций непрерывного спектра энергии $\{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\}$.

В настоящей статье метод работ [5, 6] переносится на область непрерывного спектра энергии ($E > 0$). В этом случае собственные значения $\alpha_\nu^{(+)}$ и собственные функции $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ становятся комплексными величинами. Тем не менее спектр собственных значений остается дискретным, а собственные функции по-прежнему составляют счетное множество. В статье рассмотрены основные свойства величин $\alpha_\nu^{(+)}$ и функций $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$. В предположении

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

о полноте системы $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ дано решение задачи об упругом рассеянии плоской волны на произвольном потенциале. Найдено точное формальное выражение для амплитуды рассеяния $f(\mathbf{n},\mathbf{n}')$, содержащее характерные для данного потенциала величины — собственные значения $\alpha_\nu^{(+)}$ и коэффициенты из асимптотик собственных функций $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$. Полученная для $f(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ формула удовлетворяет требованиям общего характера (условие унитарности и др.) и воспроизводит известные результаты в различных предельных случаях. Таким образом, установленное в работе общее выражение для $f(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ содержит в себе все предыдущие результаты и позволяет исследовать амплитуду упругого рассеяния во всем диапазоне изменения ее основных аргументов — энергии и величины потенциала.

В Приложении В метод работ [5, 6] обобщен также на область комплексных энергий $E$. В этом случае собственные функции и собственные значения могут быть определены при всех $\operatorname{Im}\sqrt{E} > 0$ (или, что то же, $\operatorname{Re}\sqrt{-E} > 0$), т. е. на всем физическом листе римановой поверхности [1]. При таком подходе величины $\alpha_\nu$, $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и $\alpha_\nu^{(+)}$, $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ являются предельными случаями собственных значений и собственных функций, определенных для комплексной энергии, соответственно на действительных полуосях $E < 0$ и $E > 0$. Таким образом, с другой стороны, знание величин $\alpha_\nu$, $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ или $\alpha_\nu^{(+)}$, $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ на этих полуосях позволяет найти собственные значения и собственные функции на всем физическом листе с помощью аналитического продолжения.

## 2. ОБЛАСТЬ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Приведем основные результаты метода квантования потенциала в области отрицательных энергий (см. [6]), которые понадобятся в дальнейшем.

Представим потенциальную энергию $U(\mathbf{r})$ в виде $U(\mathbf{r}) = U^0\, v(\mathbf{r})$, где $U^0$ — величина потенциала, а функция $v(\mathbf{r})$ задает его форму. Далее ограничимся рассмотрением случая, когда $0 \leqslant v(\mathbf{r}) \leqslant 1$ и $v(\mathbf{r})$ при $r \to \infty$ достаточно быстро (например, экспоненциально) обращается в нуль. Стационарное уравнение Шредингера запишем в виде

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

где $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$, $\alpha = 2mU^0/\hbar^2$.

**1.** В методе квантования потенциала в качестве объекта квантования выбирается величина $\alpha$, так что при отрицательной энергии для собственных функций $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ имеем следующее уравнение:

$$\nabla^2\varphi_\nu(\mathbf{r}) + \varepsilon\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \alpha_\nu v(\mathbf{r})\varphi_\nu(\mathbf{r}), \quad \varepsilon = -\varkappa^2 < 0. \qquad (2)$$

Здесь энергия играет роль параметра, от которого зависят как собственные значения $\alpha_\nu = \alpha_\nu(\varepsilon) < 0$, так и собственные функции $\varphi_\nu = \varphi_\nu(\varepsilon;\mathbf{r})$.

Из уравнения (2) находим асимптотическое поведение собственной функции: при $r \to \infty$ имеем $\varphi_\nu(\mathbf{r}) \propto r^{-1}\exp -\varkappa r$, где $\varkappa = \sqrt{-\varepsilon}$. Умножая (2) на комплексно сопряженную функцию $\varphi_\nu^*(\mathbf{r})$ и интегрируя по всему пространству, убеждаемся, что собственное значение $\alpha_\nu$ — вещественно и при $\varepsilon \leqslant 0$ отрицательно. В этом случае собственные функции могут быть выбраны действительными, что в дальнейшем будем предполагать выполненным.

Обычным образом выясняем, что собственные функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\mu(\mathbf{r})$ ортогональны с весом $v(\mathbf{r})$, если $\alpha_\nu \neq \alpha_\mu$. Поэтому соотношение ортонормированности для системы $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ запишем в виде

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

где функции $\varphi_\mu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ берутся при одной и той же энергии $\varepsilon$.

Есть основания полагать (см. [6]), что система $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ полна, так что произвольная функция $f(\mathbf{r})$ может быть разложена в ряд:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_\nu f_\nu\varphi_\nu(\mathbf{r}), \quad f_\nu = \int f(\mathbf{r})\varphi_\nu(\mathbf{r})v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \qquad (4)$$

Для того чтобы этот ряд сходился к самой функции $f(\mathbf{r})$, должно выполняться равенство

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

являющееся соотношением полноты для системы собственных функций $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$. В (5) $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r}')$ берутся при одной и той же энергии $\varepsilon$. Соотношение (5) справедливо для тех $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, для которых $v(\mathbf{r}) \neq 0$ и $v(\mathbf{r}') \neq 0$.

Обозначим через $\widetilde{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ и $\widetilde{\alpha}_\nu$ собственные функции и собственные значения, отвечающие энергии $\widetilde{\varepsilon}$. Тогда, как и в [6], может быть получено соотношение

$$(\alpha_\nu - \widetilde{\alpha}_\mu)\int \varphi_\nu(\mathbf{r})\,\widetilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r})\,v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} = \\ = (\varepsilon - \widetilde{\varepsilon})\int \varphi_\nu(\mathbf{r})\,\widetilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}; \quad \widetilde{\alpha}_\mu = \alpha_\mu(\widetilde{\varepsilon}). \qquad (6)$$

Положив в (6) $\mu = \nu$, после перехода к пределу $\widetilde{\varepsilon} \to \varepsilon$ получим

$$\int [\varphi_\nu(\mathbf{r})]^2\, d\mathbf{r} = \frac{d\alpha_\nu}{d\varepsilon}\,, \tag{7}$$

откуда следует, в частности, что $d\alpha_\nu/d\varepsilon > 0$.

Введем нулевую функцию Грина

$$G^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad \varkappa = \sqrt{-\varepsilon}, \tag{8}$$

подчиняющуюся уравнению

$$\nabla^2_{\mathbf{r}}\, G^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \varepsilon\, G^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,. \tag{9}$$

С помощью $G^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ дифференциальное уравнение (2) может быть преобразовано к интегральному виду

$$\varphi_\nu(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha_\nu(\varkappa)}{4\pi}\int \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\varphi_\nu(\mathbf{r}')\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \tag{10}$$

Из (10) находим асимптотическое выражение для собственной функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$:

$$r\to\infty: \quad \varphi_\nu(\mathbf{r}) \approx -\frac{\alpha_\nu(\varkappa)\, u_\nu(\mathbf{n},\varkappa)}{4\pi}\,\frac{1}{r}\, e^{-\varkappa r}; \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \tag{11}$$

$$u_\nu(\mathbf{n},\varkappa) = \int e^{\varkappa\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'}\, \varphi_\nu(\mathbf{r}')\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'\,. \tag{12}$$

Заметим, что сравнение (12) с (4) показывает, что величины $u_\nu(\mathbf{n},\varkappa)$ являются коэффициентами разложения по системе $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ функции $f(\mathbf{r}') = \exp(\varkappa\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})$:

$$e^{\varkappa\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_\nu u_\nu(\mathbf{n},\varkappa)\, \varphi_\nu(\mathbf{r})\,, \tag{13}$$

где функция $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ берется при $\varepsilon = -\varkappa^2$.

Задача о связанном состоянии частицы в потенциале $\alpha\, v(\mathbf{r})$ (где $\alpha < 0$) решается с помощью разложения искомой волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ по системе собственных функций данного потенциала $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$. В результате для определения уровня энергии $\varepsilon_\nu = \varepsilon_\nu(\alpha)$ получаем уравнение

$$\alpha_\nu(\varepsilon) = \alpha\,, \tag{14}$$

которое может иметь вещественные решения только при $\alpha < 0$. Волновая функция $\psi_\nu(\mathbf{r})$ связанного состояния с энергией $\varepsilon_\nu$ выражается через $\varphi_\nu(\varepsilon;\mathbf{r})$ следующим образом:

$$\psi_\nu(\mathbf{r}) = C_\nu\, \varphi_\nu(\varepsilon;\mathbf{r})\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_\nu}\,, \tag{15}$$

$$C_\nu = \left(\left[\frac{d\alpha_\nu}{d\varepsilon}\right]_{\varepsilon=\varepsilon_\nu}\right)^{-1/2} = \left[\frac{d\varepsilon_\nu(\alpha)}{d\alpha}\right]^{1/2}. \tag{16}$$

Коэффициент $C_\nu$ определен из соотношения (7).

При $r\to\infty$ из (16) и (11) находим асимптотическое выражение для волновой функции связанного состояния

$$r\to\infty: \quad \psi_\nu(\mathbf{r}) \approx A_\nu(\mathbf{n})\,\frac{e^{-\varkappa_\nu r}}{r}, \tag{17}$$

$$A_\nu(\mathbf{n}) = -C_\nu\left[\frac{\alpha_\nu(\varkappa)\, u_\nu(\mathbf{n},\varkappa)}{4\pi}\right]_{\varepsilon=\varepsilon_\nu}. \tag{18}$$

Отметим, что в силу равенств (6) и (7) для волновых функций связанных состояний (15), (16) выполняется соотношение ортонормированности в «нормальном» виде:

$$\int \psi_\mu(\mathbf{r})\, \psi_\nu(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}\,. \tag{19}$$

В то же время для исчезающих на бесконечности потенциалов функции $\psi_\nu(\mathbf{r})$, в отличие от системы $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$, не образуют полного набора.

При рассмотрении свойств $\alpha_\nu(\varkappa)$ и $\varphi_\nu(\varkappa;\mathbf{r})$ при малых $\varkappa$ ($\varkappa a \ll 1$, где $a$ — эффективный радиус действия потенциала) в качестве базиса выбираем состояния с нулевой энергией. Соответствующие собственные функции $\zeta_\nu(\mathbf{r}) = \varphi_\nu(0;\mathbf{r})$ удовлетворяют уравнению

$$\nabla^2\, \zeta_\nu(\mathbf{r}) = \lambda_\nu\, v(\mathbf{r})\, \zeta_\nu(\mathbf{r}), \tag{20}$$

где $\lambda_\nu = \alpha_\nu(0)$. Величины $\lambda_\nu$ и $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ вещественны, причем $\lambda_\nu < 0$. Функции $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ образуют ортонормированную полную систему. Соотношения ортонормированности и полноты для $\{\zeta_\nu(\mathbf{r})\}$ по форме совпадают с (3) и (5).

Интегральное уравнение для $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ следует в пределе $\varkappa\to 0$ из равенства (10):

$$\zeta_\nu(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda_\nu}{4\pi}\int \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, \zeta_\nu(\mathbf{r}')\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \tag{21}$$

Если $v(\mathbf{r})$ достаточно быстро убывает с ростом $r$, то из уравнения (21) следует, что асимптотика функции $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ имеет «электростатический» вид

$$r\to\infty: \quad \zeta_\nu(\mathbf{r}) \approx \frac{Q_\nu}{r} + \frac{(\mathbf{r}\mathbf{d}_\nu)}{r^3} + \ldots \tag{22}$$

Здесь $Q_\nu$, $\mathbf{d}_\nu\,, \ldots$ — аналоги электростатических зарядов, дипольного момента и т. д.

При малых $\varkappa$ для состояния, имеющего при $\varkappa = 0$ монопольную асимптотику («$s$-состояние»), собственная функция имеет вид

$$r \gg a: \quad \varphi_{s\nu}(\mathbf{r}) \approx Q_\nu \, \frac{e^{-\varkappa r}}{r}\,. \tag{23}$$

Для вычисления линейной по $\varkappa$ поправки к $\lambda_{s\nu}$ воспользуемся формулой (7). В результате получаем

$$\alpha_{s\nu}(\varkappa) = \lambda_{s\nu} - \varkappa \cdot 4\pi\, Q_\nu^2 + \ldots \tag{24}$$

Из сравнения (23) с асимптотикой (11) находим

$$u_{s\nu}^{(0)} = -\frac{4\pi\, Q_\nu}{\lambda_{s\nu}}, \tag{25}$$

где $u_{s\nu}^{(0)} = u_{s\nu}(\mathbf{n}, 0)$.

Подставив (24) в уравнение (14), для соответствующего уровня энергии связанного состояния получим следующее выражение:

$$\varepsilon_{s\nu} = -\varkappa_{s\nu}^2\,, \quad \varkappa_{s\nu} = \frac{\lambda_{s\nu} - \alpha}{4\pi\, Q_\nu^2}\,. \tag{26}$$

Уровень (26) является действительным при $|\alpha| > |\lambda_{s\nu}|$.

**2.** Для центрально-симметричных потенциалов функция $v(\mathbf{r})$ зависит только от $r = |\mathbf{r}|$. В этом случае задача может быть упрощена путем отделения от собственной функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ угловой части.

Для того чтобы функция $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ при этом оставалась действительной, введем вещественные сферические функции $Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})$:

$$Y_{lm}^{(1)}(\mathbf{n}) = a_{lm} P_l^m(\cos\theta)\cos m\phi, \quad 0 \leqslant m \leqslant l, \tag{27}$$

$$Y_{lm}^{(2)}(\mathbf{n}) = a_{lm}\, P_l^m(\cos\theta)\,\sin m\phi, \quad 1 \leqslant m \leqslant l; \tag{28}$$

$$a_{lm} = \left[\frac{2l+1}{2\pi(1+\delta_{m0})}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{29}$$

Здесь $P_l^m(x)$ — присоединенные полиномы Лежандра и

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r} = \{\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta\}\,. \tag{30}$$

Система сферических функций $\left\{Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\right\}$ ($\lambda = 1, 2$) является ортонормированной

$$\int Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\, Y_{l'm'}^{(\lambda')}(\mathbf{n})\, d\mathbf{n} = \delta_{\lambda\lambda'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}, \tag{31}$$

где $d\mathbf{n} = do = \sin\theta\, d\theta\, d\phi$, и полной

$$\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{l} Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') = \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}'), \tag{32}$$

$$\delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}') = \frac{1}{\sin\theta}\,\delta(\theta - \theta')\,\delta(\phi - \phi'). \tag{33}$$

Отметим также, что

$$\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{m=0}^{l} Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') = \frac{2l+1}{4\pi}\, P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'), \tag{34}$$

где $P_l(x)$ — обычные полиномы Лежандра.

Собственную функцию $\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \varphi_{\lambda lmn}(r, \theta, \phi)$ представим в виде

$$\varphi_{\lambda lmn}(\mathbf{r}) = \varphi_{ln}(r)\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,. \tag{35}$$

Подстановка (35) в (2) дает следующее уравнение для радиальной функции $\varphi_{ln}(r)$:

$$\frac{d^2\varphi_{ln}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d\varphi_{ln}(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\,\varphi_{ln}(r) + \\ + \varepsilon\,\varphi_{ln}(r) = \alpha_{ln}\, v(r)\,\varphi_{ln}(r)\,. \tag{36}$$

Индексом $n$ отмечены различные решения уравнения (36) при фиксированном $l$. Система радиальных собственных функций $\{\varphi_{ln}(r)\}$ при фиксированном $l$ ортонормирована

$$\int\limits_0^\infty \varphi_{ln}(r)\,\varphi_{ln'}(r)\, v(r)\, r^2\, dr = \delta_{nn'} \tag{37}$$

и полна

$$v(r)\sum_n \varphi_{ln}(r)\,\varphi_{ln}(r') = \frac{1}{r^2}\,\delta(r - r')\,. \tag{38}$$

Для $G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ из (8) справедливо разложение

$$G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\lambda lm} G_l^0(r, r')\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') \tag{39}$$

с парциальной нулевой функцией Грина

$$G_l^0(r, r') = -\frac{2\varkappa}{\pi}\Big\{ k_l(\varkappa r)\, i_l(\varkappa r')\,\theta(r - r') + \\ + \; i_l(\varkappa r)\, k_l(\varkappa r')\,\theta(r' - r)\Big\}. \tag{40}$$

Здесь $k_l(x)$ и $i_l(x)$ — сферические функции соответственно Макдональда и Бесселя мнимого аргумента [7]; $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$. Выражение (40) удовлетворяет уравнению

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\varkappa^2\right\}G_l^0(r,r')=\\=\frac{\delta(r-r')}{r^2}\,. \quad (41)$$

Уравнение (36) с помощью $G_l^0(r,r')$ преобразуем к интегральному виду

$$\varphi_{ln}(r)=\alpha_{ln}(\varkappa)\int\limits_0^\infty G_l^0(r,r')\varphi_{ln}(r')v(r')(r')^2\,dr'. \quad (42)$$

Поскольку

$$x\to\infty:\quad k_l(x)\approx\frac{\pi}{2x}\,e^{-x}\,,\quad i_l(x)\approx\frac{1}{2x}\,e^x, \quad (43)$$

из (42) следует

$$r\to\infty:\quad \varphi_{ln}(r)\approx-\frac{\alpha_{ln}(\varkappa)\,u_{ln}(\varkappa)}{4\pi}\,\frac{e^{-\varkappa r}}{r}, \quad (44)$$

$$u_{ln}(\varkappa)=4\pi\int\limits_0^\infty i_l(\varkappa r)\,\varphi_{ln}(r)\,v(r)\,r^2\,dr. \quad (45)$$

Нетрудно видеть, что величина $u_{ln}/(4\pi)$ из (44), (45) является коэффициентом разложения функции $i_l(\varkappa r)$ по системе $\{\varphi_{ln}(r)\}$, так что

$$i_l(\varkappa r)=\frac{1}{4\pi}\sum_n u_{ln}(\varkappa)\,\varphi_{ln}(r) \quad (46)$$

с $\varphi_{ln}(r)$, взятой при $\varepsilon=-\varkappa^2$.

Положив

$$u_\nu(\mathbf{n},\varkappa)\to u_{\lambda lmn}(\mathbf{n},\varkappa)=u_{ln}(\varkappa)\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,, \quad (47)$$

приведем выражение (13) к следующему виду:

$$e^{\varkappa\,\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'r}=\sum_{l\,=\,0}^\infty\left\{\sum_n u_{ln}(\varkappa)\,\varphi_{ln}(r)\right\}\times\\\times\sum_{\lambda m}Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}')\,. \quad (48)$$

Согласно (46) сумма в фигурных скобках равна $4\pi\,i_l(\varkappa r)$, так что из (48) получаем

$$e^{\varkappa\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'r}=4\pi\sum_{l=0}^\infty i_l(\varkappa r)\,\sum_{\lambda m}Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}')\,. \quad (49)$$

Уровни энергии $\varepsilon_{ln}$ в потенциале $\alpha\,v(r)$ ищутся из уравнения, аналогичного (14)

$$\alpha_{ln}(\varepsilon)=\alpha\,. \quad (50)$$

Для радиальной волновой функции связанного состояния $R_{ln}(r)$, определяемой согласно $\psi_\nu(\mathbf{r})\to\to\psi_{\lambda lmn}(\mathbf{r})=R_{ln}(r)\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})$, получаем выражение

$$R_{ln}(r)=C_{ln}\,\varphi_{ln}(r)\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_{ln}}\,,\\ C_{ln}=\left[\frac{d\varepsilon_{ln}(\alpha)}{d\alpha}\right]^{1/2}\,, \quad (51)$$

из которого при $r\to\infty$ находим асимптотику этой функции

$$R_{ln}(r)\approx A_{ln}\,\frac{e^{-\varkappa_{ln}r}}{r}\,,\\ A_{ln}=-C_{ln}\,\left[\frac{\alpha_{ln}\,u_{ln}}{4\pi}\right]_{\varepsilon=\varepsilon_{ln}}\,. \quad (52)$$

Коэффициент $C_{ln}$ в (51) определен из равенства

$$\int\limits_0^\infty[\varphi_{ln}(r)]^2\,r^2\,dr=\frac{d\alpha_{ln}}{d\varepsilon}\,, \quad (53)$$

следующего из соотношения (7).

Для центрально-симметричного потенциала

$$Q_\nu\to Q_{100n}=Q_n\,Y_{00}^{(1)}=Q_n/\sqrt{4\pi},$$

так что для энергии слабосвязанного $s$-состояния ($l=0$) из (26) получаем выражение

$$\varepsilon_{0n}=-\varkappa_{0n}^2\,,\quad \varkappa_{0n}=\frac{\lambda_{0n}-\alpha}{Q_n^2}\,, \quad (54)$$

где $|\alpha|>|\lambda_{0n}|$.

## 3. ОБЛАСТЬ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА ЭНЕРГИИ

Как известно [1], при $\varepsilon=k^2>0$ квантования энергии не происходит и она принимает любые положительные значения. В этом случае состояния частицы описываются волновыми функциями непрерывного спектра $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, являющимися решениями задачи о рассеянии плоской волны. Совокупность $\{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\}$ вместе с волновыми функциями связанных состояний (если они есть) $\{\psi_\nu(\mathbf{r})\}$ образуют полную систему [1, 8]. При решении задач традиционными методами необходимо использовать, вообще говоря, оба типа волновых функций.

**1.** Альтернативный подход — квантование потенциала — может быть реализован и при $\varepsilon>0$. В области непрерывного спектра энергии собственные функции $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$, являющиеся решениями уравнения

$$\nabla^2\,\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})+\varepsilon\,\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})=\alpha_\nu^{(+)}\,v(\mathbf{r})\,\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\,,\\ \varepsilon=k^2>0, \quad (55)$$

по-прежнему образуют счетное множество, а собственные значения $\alpha_\nu^{(+)}$ дискретны. В то же время, в отличие от случая $\varepsilon < 0$, и $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\alpha_\nu^{(+)}$ при $\varepsilon > 0$ становятся комплексными величинами.

Уравнение (55) при $r \gg a$, когда можно пренебречь его правой частью, имеет два типа решений со следующим асимптотическим поведением:

$$\varphi_\nu^{(\pm)}(\mathbf{r}) \propto r^{-1} \exp(\pm ikr),$$

где $k = \sqrt{\varepsilon} > 0$. Функциям $\varphi_\nu^{(\pm)}(\mathbf{r})$ отвечают разные собственные значения $\alpha_\nu^{(\pm)}$.

Решение $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ выберем в качестве собственной функции, которой отвечает собственное значение $\alpha_\nu^{(+)}$. Как показано в Приложении В, второе решение — функция $\varphi_\nu^{(-)}(\mathbf{r})$ и соответствующее собственное значение $\alpha_\nu^{(-)}$ связаны с $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\alpha_\nu^{(+)}$ следующим образом:

$$\varphi_\nu^{(-)}(\mathbf{r}) = \varphi_\nu^{(+)*}(\mathbf{r}), \quad \alpha_\nu^{(-)} = \alpha_\nu^{(+)*}, \qquad (56)$$

где звездочка означает комплексное сопряжение.

Обычным образом выясняем, что собственные функции $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r})$ ортогональны с весом $v(\mathbf{r})$, если $\alpha_\nu^{(+)} \neq \alpha_\mu^{(+)}$. Поэтому соотношение ортонормированности для системы $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ запишем в виде, аналогичном (3):

$$\int \varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r})\, \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\, v(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}. \qquad (57)$$

Предположим далее, что система собственных функций $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ полна, так что

$$v(\mathbf{r}) \sum_\nu \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\, \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \qquad (58)$$

Здесь и в (57) обе функции берутся при одной и той же энергии $\varepsilon = k^2$. Отметим, что в равенствах (57) и (58) отсутствует комплексное сопряжение какой-либо из собственных функций.

При $\varepsilon > 0$ нулевая функция Грина $G^{0(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ отличается от (8) только заменой $\varkappa \to -ik$, так что интегральное уравнение для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)}{4\pi} \int \frac{e^{ik\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \times \times \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}')\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \qquad (59)$$

Отсюда находим асимптотическое выражение для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$:

$$r \to \infty: \quad \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \approx -\frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)\, u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k)}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \qquad (60)$$

$$u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k) = \int e^{-ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'}\, \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}')\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \qquad (61)$$

Величины $u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k)$ являются коэффициентами разложения по системе $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ функции $f(\mathbf{r}) = \exp(ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})$:

$$e^{ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_\nu u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k)\, \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}), \qquad (62)$$

где функция $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ берется при $\varepsilon = k^2$, а $\mathbf{n}$ — произвольный единичный вектор.

Применим к уравнению (55) для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ операцию комплексного сопряжения и заменим индекс $\nu$ на $\mu$:

$$\nabla^2 \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}) + \varepsilon\, \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}) = = \alpha_\mu^{(+)*} v(\mathbf{r})\, \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}), \quad \varepsilon = k^2. \qquad (63)$$

Умножив это равенство на $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$, вычтем его из уравнения (55) для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$, умноженного на $\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})$, и проинтегрируем по всему пространству. В результате получим соотношение

$$\lim_{r\to\infty} \left\{ r^2 \int \left[ \varphi_\mu^{(+)*} \frac{\partial \varphi_\nu^{(+)}}{\partial r} - \varphi_\nu^{(+)} \frac{\partial \varphi_\mu^{(+)*}}{\partial r} \right] d\mathbf{n} \right\} = = (\alpha_\nu^{(+)} - \alpha_\mu^{(+)*}) \int \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\, \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})\, v(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}, \qquad (64)$$

в левой части которого интеграл преобразован в поверхностный по сфере радиуса $r \to \infty$. Используя для вычисления этого интеграла асимптотику (60), найдем соотношение

$$\frac{ik}{2\pi} \int u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k) u_\mu^{(+)*}(\mathbf{n}, k)\, \frac{d\mathbf{n}}{4\pi} = = \frac{\alpha_\nu^{(+)} - \alpha_\mu^{(+)*}}{\alpha_\nu^{(+)}\, \alpha_\mu^{(+)*}} \int \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\, \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})\, v(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}. \qquad (65)$$

Из (65) при $\mu = \nu$ следует

$$\operatorname{Im} \alpha_\nu^{(+)}(k) = \frac{k}{4\pi} \left| \alpha_\nu^{(+)}(k) \right|^2 \overline{\left| u_\nu^{(+)} \right|^2} \times \times \left[ \int \left| \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \right|^2 v(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \right]^{-1}, \qquad (66)$$

$$\overline{\left| u_\nu^{(+)} \right|^2} = \int \left| u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k) \right|^2 \frac{d\mathbf{n}}{4\pi}. \qquad (67)$$

Согласно (66), $\operatorname{Im} \alpha_\nu^{(+)}(k) > 0$ при рассматриваемых $v(\mathbf{r}) > 0$ и $k = \sqrt{\varepsilon} > 0$.

Для $s$-состояний с малой энергией ($ka \ll 1$) аналогично (23)–(25) имеем

$$r \gg a: \quad \varphi_{s\nu}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx Q_\nu \, \frac{e^{ikr}}{r}\,, \tag{68}$$

$$\alpha_{s\nu}^{(+)}(k) = \lambda_{s\nu} + ik\,4\pi\, Q_\nu^2 + \ldots, \tag{69}$$

$$u_{s\nu}^{(+)}(\mathbf{n}, k) \approx u_{s\nu}(\mathbf{n}, 0) = -\frac{4\pi\, Q_\nu}{\lambda_{s\nu}}\,. \tag{70}$$

**2.** В случае центрально-симметричных потенциалов

$$\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \to \varphi_{\lambda lmn}^{(+)}(\mathbf{r}) = \varphi_{ln}^{(+)}(r)\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}),$$

где радиальная функция $\varphi_{ln}^{(+)}(r)$ (с собственным значением $\alpha_{ln}^{(+)}(k)$) является решением уравнения вида (36) с $\varepsilon = k^2$. Из равенств (57) и (58) для системы $\{\varphi_{ln}^{(+)}(r)\}$ следуют соотношения ортонормированности

$$\int\limits_0^\infty \varphi_{ln}^{(+)}(r)\, \varphi_{ln'}^{(+)}(r)\, v(r)\, r^2\, dr = \delta_{nn'} \tag{71}$$

и полноты

$$v(r) \sum_n \varphi_{ln}^{(+)}(r)\, \varphi_{ln}^{(+)}(r') = \frac{\delta(r - r')}{r^2}\,, \tag{72}$$

справедливые при каждом фиксированном $l$.

Для парциальной нулевой функции Грина $G_l^{0(+)}(r, r')$ при $\varepsilon = k^2 > 0$ имеем следующее выражение:

$$G_l^{0(+)}(r, r') = -ik \left\{ h_l^{(1)}(kr)\, j_l(kr')\, \theta(r - r') + \right. \\ \left. + j_l(kr)\, h_l^{(1)}(kr')\, \theta(r' - r) \right\}, \tag{73}$$

где $j_l(x)$ и $h_l^{(1)}(x)$ — сферические функции Бесселя и Ханкеля (первого рода). Интегральное уравнение для радиальной собственной функции $\varphi_{ln}^{(+)}(r)$ имеет вид

$$\varphi_{ln}^{(+)}(r) = \alpha_{ln}^{(+)}(k) \times \\ \times \int\limits_0^\infty G_l^{0(+)}(r, r')\, \varphi_{ln}^{(+)}(r')\, v(r')\, (r')^2\, dr' \tag{74}$$

с $G_l^{0(+)}(r, r')$ из (73). Поскольку

$$x \to \infty: \quad h_l^{(1)}(x) \approx (-i)^{l+1}\, \frac{e^{ix}}{x}\,, \tag{75}$$

из (74) следует

$$r \to \infty: \quad \varphi_{ln}^{(+)}(r) \approx -\frac{\alpha_{ln}^{(+)}(k)\, u_{ln}^{(+)}(k)}{4\pi}\, \frac{e^{ikr}}{r}, \tag{76}$$

$$u_{ln}^{(+)}(k) = (-i)^l\, 4\pi \int\limits_0^\infty j_l(kr) \varphi_{ln}^{(+)}(r)\, v(r)\, r^2\, dr, \tag{77}$$

так что имеет место разложение

$$j_l(kr) = \frac{i^l}{4\pi} \sum_n u_{ln}^{(+)}(k)\, \varphi_{ln}^{(+)}(r)\,. \tag{78}$$

Подстановка $u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k) \to u_{ln}^{(+)}(k)\, Y_{lm}^{(\lambda)}(-\mathbf{n})$ в общую формулу (62) дает

$$e^{ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\lambda lm} \left[ \sum_n u_{ln}^{(+)}(k)\, \varphi_{ln}^{(+)}(r) \right] \times \\ \times Y_{lm}^{(\lambda)}(-\mathbf{n})\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m}), \tag{79}$$

где $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$. Здесь, согласно (78), выражение в квадратных скобках равно $(-i)^l\, 4\pi\, j_l(kr)$, так что разложение (79) с учетом $Y_{lm}^{(\lambda)}(-\mathbf{n}) = (-1)^l\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})$ принимает вид

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\lambda lm} i^l\, j_l(kr)\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\, Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m}) \tag{80}$$

или, после суммирования по $\lambda$ и $m$,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^\infty i^l\, j_l(kr)\, (2l + 1)\, P_l(\mathbf{n} \cdot \mathbf{m})\,. \tag{81}$$

Равенство (81) представляет собой известное разложение плоской волны [1].

Поскольку при $x \to \infty$

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x} \sin\left(x - l\,\frac{\pi}{2}\right) = \\ = (-i)^l\; \frac{e^{ix} - (-1)^l\, e^{-\,ix}}{2ix}, \tag{82}$$

из разложения (80) получаем следующее асимптотическое выражение для плоской волны [8]:

$$r \to \infty: \quad e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx \frac{2\pi i}{kr} \times \\ \times \left\{ e^{-\,ikr}\, \delta(\mathbf{n} + \mathbf{m}) - e^{ikr}\, \delta(\mathbf{n} - \mathbf{m}) \right\}. \tag{83}$$

При выводе асимптотики (83) использовано соотношение полноты (32) для системы $\left\{Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\right\}$.

В случае малых энергий ($k \to 0$) из (69) и (70) следует

$$\alpha_{0n}^{(+)}(k) = \lambda_{0n} + ik\, Q_n^2 + \ldots, \quad u_{0n}^{(+)} \approx -\frac{4\pi\, Q_n}{\lambda_{0n}}. \tag{84}$$

При $l \geqslant 1$ согласно [9] имеем ($k \to 0$)

$$\alpha_{ln}^{(+)}(k) = \lambda_{ln} + k^2\,\beta_{ln}^{(2)} + \ldots + ik^{2l+1} \times \\ \times \left\{ \left[ \frac{b_{ln}}{(2l-1)!!} \right]^2 + \ldots \right\}, \quad (85)$$

$$u_{ln}^{(+)}(k) \approx -\frac{4\pi}{\lambda_{ln}}\,\frac{(-\,ik)^l}{(2l-1)!!}\,b_{ln}\,. \quad (86)$$

Здесь и в (85) $b_{ln}$ — константа, входящая в асимптотику собственной функции при нулевой энергии:

$$r \to \infty: \quad \zeta_{ln}(r) \approx \frac{b_{ln}}{r^{l+1}}\,, \quad (87)$$

причем $b_{0n} = Q_n$. Коэффициент $\beta_{ln}^{(2)}$ из (85) выражается через интеграл

$$\beta_{ln}^{(2)} = \int_0^\infty \left[\zeta_{ln}(r)\right]^2 r^2\,dr\,, \quad (88)$$

сходящийся при $l \geqslant 1$.

## 4. АМПЛИТУДА РАССЕЯНИЯ

В задаче об упругом рассеянии плоской волны $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ на потенциале $\alpha\,v(\mathbf{r})$ необходимо найти решение уравнения (1) (при энергии $\varepsilon = k^2$) — функцию $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, обладающую следующей асимптотикой:

$$r \to \infty: \quad \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{n},\mathbf{m})\,\frac{e^{ikr}}{r}\,. \quad (89)$$

Здесь $f(\mathbf{n},\mathbf{m})$ — амплитуда упругого рассеяния, $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ и $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$.

**1.** Положим

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \varphi(\mathbf{r})\,, \quad (90)$$

где функция $\varphi(\mathbf{r})$ описывает рассеянную волну. Подстановка (90) в (1) приводит к неоднородному уравнению для $\varphi(\mathbf{r})$:

$$\nabla^2\,\varphi(\mathbf{r}) + k^2\,\varphi(\mathbf{r}) - \alpha\,v(\mathbf{r})\,\varphi(\mathbf{r}) = \alpha\,v(\mathbf{r})\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,. \quad (91)$$

Величину $\varphi(\mathbf{r})$ ищем в виде разложения по системе собственных функций $\left\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\right\}$ данного потенциала

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_\mu \Phi_\mu\,\varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r})\,. \quad (92)$$

Подстановка (92) в уравнение (91) дает

$$\sum_\mu \Phi_\mu\,\left(\alpha_\mu^{(+)}(k) - \alpha\right)\,v(\mathbf{r})\,\varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r}) = \\ = \alpha\,v(\mathbf{r})\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,. \quad (93)$$

Умножив равенство (93) на $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и проинтегрировав по всему пространству, определим коэффициент $\Phi_\nu$. В результате для искомой функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ получим следующее выражение:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \alpha \sum_\nu \frac{u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n},k)}{\alpha_\nu^{(+)}(k) - \alpha}\,\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\,. \quad (94)$$

Здесь учтено определение (61). Находя асимптотику $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ с помощью (60) и сравнивая с (89), найдем

$$f(\mathbf{n},\mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi} \sum_\nu \frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)}{\alpha_\nu^{(+)}(k) - \alpha} \times \\ \times u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n},k)\,u_\nu^{(+)}(\mathbf{m},k)\,. \quad (95)$$

Формулой (95) дается общее выражение для амплитуды упругого рассеяния.

Для центрально-симметричного потенциала функция $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ может быть разложена в ряд, аналогичный (80):

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{\lambda lm} \psi_{kl}^{(+)}(r)\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m})\,. \quad (96)$$

Радиальная функция $\psi_{kl}^{(+)}(r)$ является решением уравнения

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\psi_{kl}^{(+)}(r) = \\ = \alpha\,v(r)\,\psi_{kl}^{(+)}(r) \quad (97)$$

с асимптотикой

$$r \to \infty: \quad \psi_{kl}^{(+)}(r) \approx i^l\,j_l(kr) + f_l(k)\,\frac{e^{ikr}}{r}\,, \quad (98)$$

где для $j_l(kr)$ следует использовать, в свою очередь, асимптотическое разложение (82). В (98) $f_l(k)$ — парциальная амплитуда упругого рассеяния, связанная с $f(\mathbf{n},\mathbf{m})$ следующим образом:

$$f(\mathbf{n},\mathbf{m}) = 4\pi \sum_{\lambda lm} f_l(k)\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m})\,, \quad (99)$$

так что из (95) получаем

$$f_l(k) = (-1)^{l+1}\,\frac{\alpha}{(4\pi)^2} \times \\ \times \sum_n \frac{\alpha_{ln}^{(+)}(k)}{\alpha_{ln}^{(+)}(k) - \alpha}\,\left[u_{ln}^{(+)}(k)\right]^2. \quad (100)$$

**2.** Заметим, что амплитуда рассеяния, даваемая формулой (95), очевидным образом удовлетворяет теореме взаимности [1]

$$f(\mathbf{n},\mathbf{m}) = f(-\mathbf{m},-\mathbf{n})\,. \tag{101}$$

Кроме того, для величины $f(\mathbf{n},\mathbf{m})$ должно выполняться соотношение унитарности [1]

$$f(\mathbf{n},\mathbf{m}) - f^*(\mathbf{m},\mathbf{n}) = \frac{ik}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\mathbf{l})\,f^*(\mathbf{m},\mathbf{l})\,d\mathbf{l}\,. \tag{102}$$

В Приложении A показано, что выражение (95) удовлетворяет и этому равенству.

Для выяснения свойств $f(\mathbf{n},\mathbf{m})$ при комплексной энергии $\varepsilon = q^2$ (где $q = k + i\,\varkappa$) рассмотрим величину

$$\bar f(\mathbf{n},\mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi}\times \\ \times\sum_\nu \frac{\bar\alpha_\nu(q)}{\bar\alpha_\nu(q)-\alpha}\,\bar u_\nu(-\mathbf{n},q)\,\bar u_\nu(\mathbf{m},q)\,, \tag{103}$$

являющуюся, согласно Приложению B, аналитическим продолжением амплитуды рассеяния (95) на полуплоскость $\operatorname{Im} q > 0$ или на физический лист соответствующей римановой поверхности [1]. С математической точки зрения выражение (103) представляет собой разложение $\bar f(\mathbf{n},\mathbf{m})$ как функции аргумента $\alpha$ на простые дроби. В каждом слагаемом из (103) имеется простой полюс при $\alpha = \bar\alpha_\nu(q)$, где $\bar\alpha_\nu(q)$ является, вообще говоря, комплексной величиной.

Полюсы в амплитуде (103) приобретают физический смысл при отрицательной энергии $\varepsilon = -\varkappa^2 < 0$. В этом случае собственные значения $\bar\alpha_\nu(i\,\varkappa) = \alpha_\nu(\varkappa) < 0$ вещественны и уравнение $\alpha_\nu(\varkappa) = \alpha$ при $\alpha < 0$ может иметь решения $\varkappa = \varkappa_\nu$, чему отвечают уровни энергии связанных состояний $\varepsilon_\nu = -\varkappa_\nu^2$.

При $\varepsilon \to \varepsilon_\nu$ из формулы (103) следует

$$\varepsilon \to \varepsilon_\nu: \quad \bar f(\mathbf{n},\mathbf{m}) \approx -4\pi\,\frac{A_\nu(-\mathbf{n})\,A_\nu(\mathbf{m})}{\varepsilon-\varepsilon_\nu}. \tag{104}$$

Здесь $A_\nu(\mathbf{n})$ — коэффициент в асимптотике (17) волновой функции $\psi_\nu(\mathbf{r})$ связанного состояния с энергией $\varepsilon_\nu$.

Аналитическое продолжение парциальной амплитуды (100) в комплексную плоскость энергии имеет вид

$$\bar f_l(q) = (-1)^{l+1}\frac{\alpha}{(4\pi)^2}\sum_n \frac{\alpha_{ln}(q)}{\alpha_{ln}(q)-\alpha}\big[u_{ln}(q)\big]^2. \tag{105}$$

Это выражение, как и должно быть [1], имеет на физическом листе $\operatorname{Im}\sqrt{\varepsilon} > 0$ простые полюсы при энергиях связанных состояний (если они есть в данном потенциале) $\varepsilon_{ln} = -\varkappa_{ln}^2 < 0$, где $\varkappa_{ln}$ является решением уравнения $\alpha_{ln}(\varkappa) = \alpha$. При $\varepsilon \to \varepsilon_{ln}$ главный член в величине $\bar f_l$ имеет следующий вид:

$$\bar f_l \approx (-1)^{l+1}\,\frac{(A_{ln})^2}{\varepsilon-\varepsilon_{ln}} = (-1)^{l+1}\,\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{(A_{ln})^2}{E-E_{ln}}\,, \tag{106}$$

что согласуется с [1]. Здесь $A_{ln}$ — коэффициент в асимптотике (52) радиальной волновой функции связанного состояния с энергией $\varepsilon_{ln}$.

В пределе $k \to 0$ ненулевой вклад в $f(\mathbf{n},\mathbf{n}')$ дают только «$s$-состояния», так что из (95) с учетом (69), (70) получаем [6]

$$k = 0: \quad f^{(0)}(\mathbf{n},\mathbf{m}) = \\ = -4\pi\alpha\sum_\nu \frac{Q_\nu^2}{\lambda_{s\nu}(\lambda_{s\nu}-\alpha)}\,. \tag{107}$$

Для центрально-симметричных потенциалов из общего выражения (100) следует

$$k = 0: \quad f_0(0) = -\,\alpha\sum_n \frac{Q_n^2}{\lambda_{0n}(\lambda_{0n}-\alpha)}\,. \tag{108}$$

Формулы (107) и (108) дают точные выражения для амплитуды рассеяния в пределе $k \to 0$.

Для потенциала притяжения ($\alpha < 0$) величина $f$ при изменении $\alpha$ проходит через ряд «резонансов» при критических значениях глубины потенциальной ямы $\alpha = \lambda_{s\nu}$ (или $\alpha = \lambda_{0n}$), отвечающих случаям, когда появляются (или исчезают) связанные состояния с нулевой энергией. При $\alpha \approx \lambda_{s\nu}$ и малых $k$ следует учесть линейную по $k$ поправку в величине $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ — см. (69). В результате для главного члена в амплитуде рассеяния получаем

$$f_s(\mathbf{n},\mathbf{m}) \approx -\frac{1}{\varkappa_{s\nu}+i\,k}\,, \quad \varkappa_{s\nu} = \frac{\lambda_{s\nu}-\alpha}{4\pi Q_\nu^2}\,. \tag{109}$$

Если $|\alpha| > \left|\lambda_{s\nu}\right|$ (при этом $\varkappa_{snu} > 0$), то в потенциале $\alpha v(\mathbf{r})$ имеется реальный уровень с энергией $\varepsilon_{s\nu} = -\big(\varkappa_{s\nu}\big)^2$ и, как и в центрально-симметричном случае [1], амплитуда рассеяния имеет полюс на физическом листе ($\operatorname{Im}\sqrt{\varepsilon} > 0$). Если же $|\alpha| < \left|\lambda_{s\nu}\right|$ $\big(\varkappa_{s\nu} < 0\big)$, то имеется виртуальный уровень и полюс расположен на нефизическом листе.

В случае центрально-симметричных потенциалов при $\alpha \approx \lambda_{0n}$ и малых $k$ из общей формулы (100) с учетом (84) для амплитуды $s$-рассеяния следует выражение

$$f_0(k) \approx -\frac{1}{\varkappa_{0n}+i\,k}\,, \quad \varkappa_{0n} = \frac{\lambda_{0n}-\alpha}{Q_n^2}, \tag{110}$$

которое по форме совпадает с [1], с тем, однако, отличием, что для феноменологической (в [1]) константы $\varkappa_{0n}$ получено явное выражение через величины, характерные для данного потенциала.

При малых $k$ для вклада в амплитуду рассеяния состояний с $l \geqslant 1$ из выражения (100) с учетом (85), (86) находим ($\varepsilon = k^2$)

$$f_l(k) \approx -\left[B_{ln}\,\frac{-\epsilon_{ln}+\varepsilon}{\varepsilon^l} + ik\right]^{-1}, \tag{111}$$

$$\epsilon_{ln} = \frac{\alpha - \lambda_{ln}}{\beta_{ln}^{(2)}}, \quad B_{ln} = \beta_{ln}^{(2)}\left[\frac{(2l-1)!!}{b_{ln}}\right]^2. \tag{112}$$

Здесь величина $\epsilon_{ln}$ при $|\alpha| > |\lambda_{ln}|$ является уровнем энергии связанного состояния (при $l \neq 0$). Выражение (111) для $f_l(k)$ функционально совпадает с соответствующей формулой из [1] (см. § 133). При этом для введенных в [1] феноменологических констант ($\epsilon_{ln}$ и $B_{ln}$ в обозначениях настоящей статьи) найдены явные выражения.

При малых $|\alpha|$ ($|\alpha| \ll |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$) из (95) следует разложение

$$f(\mathbf{n},\mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi}\sum_\nu u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n},k)\,u_\nu^{(+)}(\mathbf{m},k)\times \\ \times\left\{1 + \frac{\alpha}{\alpha_\nu^{(+)}(k)} + \left[\frac{\alpha}{\alpha_\nu^{(+)}(k)}\right]^2 + \ldots\right\}. \tag{113}$$

Для линейного по $\alpha$ члена разложения (113) (борновское приближение) с учетом определения (61) имеем

$$f_B(\mathbf{n},\mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi}\iint v(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}'\times \\ \times\exp(ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r} - ik\mathbf{m}\cdot\mathbf{r}')\times \\ \times\left[v(\mathbf{r})\sum_\nu \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\,\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}')\right]. \tag{114}$$

Здесь, согласно (58), выражение в квадратных скобках равно $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, так что из (114) получаем

$$f_B(\mathbf{n},\mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi}\,v(\mathbf{k}'-\mathbf{k}), \tag{115}$$

где $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$, $\mathbf{k}' = k\mathbf{m}$ и $v(\mathbf{k}'-\mathbf{k})$ — фурье-образ функции $v(\mathbf{r})$. В обычных единицах выражение (115) принимает вид

$$f_B(\mathbf{n},\mathbf{m}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,U(\mathbf{k}'-\mathbf{k}), \tag{116}$$

совпадающий с [1].

Условием применимости борновского приближения (116) является $|\alpha| \ll |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$. При $ka \ll 1$ величина

$$|\alpha_\nu^{(+)}(k)| \approx |\alpha_\nu^{(+)}(0)| = |\lambda_\nu| \sim 1/a^2,$$

так что приближение (116) справедливо при $|\alpha|a^2 \ll 1$ или, в обычных единицах, $|U^0| \ll \hbar^2/ma^2$. Более того, при выполнении этого условия формула Борна применима при любой энергии, так как $|\lambda_\nu| < |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$ для всех $k > 0$. В то же время при $ka \gg 1$ условие применимости борновского приближения становится менее жестким и зависит от поведения $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ при больших энергиях. Для модельного потенциала, принимающего конечное значение $U^0$ при $r = 0$, величина $\alpha_\nu^{(+)}(k) \approx k^2$ (см. формулу (63) из работы [6] с заменой $\varkappa \to -ik$), так что критерию $|\alpha| \ll |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$ отвечает $|\alpha| \ll k^2$ или $|U^0| \ll E$. Если же при $r \to 0$ потенциал имеет кулоновский вид $U(\mathbf{r}) \approx \gamma/r$, где $\gamma \sim aU^0$, то $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ линейно зависит от $k$ при $ka \gg 1$: $\alpha_\nu^{(+)}(k) \sim ik/a$ — см. Приложение В из книги [9] с заменой $\varkappa \to -ik/a$. В этом случае условием применимости борновского приближения является, как и в [1], $|U^0| \ll (\hbar^2/ma^2)\,ka$.

Таким образом, общие формулы (95) и (100) во всех рассмотренных предельных случаях воспроизводят известные результаты, давая, в то же время, более детальное описание амплитуды упругого рассеяния, чем стандартная фазовая теория [1].

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

Для проверки выполнения соотношения унитарности подставим в правую часть равенства (102) выражение (95):

$$\frac{ik}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\mathbf{l})\,f^*(\mathbf{m},\mathbf{l})\,d\mathbf{l} = \frac{\alpha^2}{4\pi}\times \\ \times\sum_\nu\sum_\mu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu-\alpha}\,\frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^*-\alpha}\,u_\nu(-\mathbf{n},k)\,u_\mu^*(-\mathbf{m},k)\times \\ \times\frac{ik}{2\pi}\int u_\nu(\mathbf{l},k)\,u_\mu^*(\mathbf{l},k)\,\frac{d\mathbf{l}}{4\pi}. \tag{A.1}$$

Здесь и далее в этом Приложении для упрощения и без того довольно громоздких формул опускаем значок «плюс» у величин $\alpha_\nu^{(+)}$, $\alpha_\mu^{(+)*}$ и $u_\nu^{(+)}$, $u_\mu^{(+)*}$, а также у $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})$.

Преобразовав интеграл от произведения $u_\nu(\mathbf{l},k)\,u_\mu^*(\mathbf{l},k)$ с помощью равенства (65), приведем (A.1) к виду

$$\frac{i\,k}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\mathbf{l})\,f^*(\mathbf{m},\mathbf{l})\,d\mathbf{l} = \\ = \frac{\alpha}{4\pi}\int d\mathbf{r}\,v(\mathbf{r})\left\{\sum_\mu \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^*-\alpha}\,u_\mu^*(-\mathbf{m},k)\,\varphi_\mu^*(\mathbf{r})\times\right. \\ \times\sum_\nu u_\nu(-\mathbf{n},k)\varphi_\nu(\mathbf{r}) - \sum_\nu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu-\alpha}u_\nu(-\mathbf{n},k)\varphi_\nu(\mathbf{r})\times \\ \left.\times\sum_\mu u_\mu^*(-\mathbf{m},k)\,\varphi_\mu^*(\mathbf{r})\right\}. \quad (A.2)$$

При выводе (A.2) использовано тождество

$$\alpha\,\frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu-\alpha}\,\frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^*-\alpha} = \frac{\alpha_\nu\alpha_\mu^*}{\alpha_\nu-\alpha_\mu^*}\times \\ \times\left[\frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^*-\alpha} - \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu-\alpha}\right]. \quad (A.3)$$

Согласно (62),

$$\sum_\nu u_\nu(-\mathbf{n},k)\,\varphi_\nu(\mathbf{r}) = e^{ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}}, \quad (A.4)$$

$$\sum_\mu u_\mu^*(-\mathbf{m},k)\,\varphi_\mu^*(\mathbf{r}) = e^{-ik\mathbf{m}\cdot\mathbf{r}}, \quad (A.5)$$

так что из (A.2) находим

$$\frac{i\,k}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\mathbf{l})\,f^*(\mathbf{m},\mathbf{l})\,d\mathbf{l} = \\ = \frac{\alpha}{4\pi}\left\{\sum_\mu \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^*-\alpha}\,u_\mu^*(-\mathbf{m},k)\times\right. \\ \times\int e^{ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}}\,\varphi_\mu^*(\mathbf{r})\,v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} - \sum_\nu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu-\alpha}u_\nu(-\mathbf{n},k)\times \\ \left.\times\int e^{-ik\mathbf{m}\cdot\mathbf{r}}\,\varphi_\nu(\mathbf{r})\,v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\right\}. \quad (A.6)$$

При учете определения (61) интегралы в правой части (A.6) оказываются равными соответственно $u_\mu^*(\mathbf{n},k)$ и $u_\nu(\mathbf{m},k)$, так что

$$\frac{i\,k}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\mathbf{l})\,f^*(\mathbf{m},\mathbf{l})\,d\mathbf{l} = \\ = \frac{\alpha}{4\pi}\left\{\sum_\mu \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^*-\alpha}\,u_\mu^*(-\mathbf{m},k)\,u_\mu^*(\mathbf{n},k) - \right. \\ \left. - \sum_\nu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu-\alpha}\,u_\nu(-\mathbf{n},k)\,u_\nu(\mathbf{m},k)\right\} = \\ = f(\mathbf{n},\mathbf{m}) - f^*(\mathbf{m},\mathbf{n}). \quad (A.7)$$

Таким образом, выражение (95) для амплитуды рассеяния удовлетворяет условию унитарности (102).

## ПРИЛОЖЕНИЕ B

**1.** При исследовании аналитических свойств амплитуды упругого рассеяния (см. [1]) и в некоторых других случаях возникает необходимость в рассмотрении свойств собственных функций при комплексных значениях энергии

$$\varepsilon(q) = q^2, \quad q = k + i\,\varkappa. \quad (B.1)$$

Для собственной функции $\bar\varphi_\nu(\mathbf{r})$ (величины, относящиеся к комплексной энергии, будем снабжать черточкой сверху) имеем уравнение

$$\nabla^2\,\bar\varphi_\nu(\mathbf{r}) + q^2\,\bar\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \bar\alpha_\nu\,v(\mathbf{r})\,\bar\varphi_\nu(\mathbf{r}), \quad (B.2)$$

где $\bar\varphi_\nu = \bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r})$ и $\bar\alpha_\nu = \bar\alpha_\nu(q)$. В качестве собственных функций выберем решения уравнения (B.2) с асимптотикой

$$\bar\varphi_\nu(\mathbf{r}) \sim \frac{e^{iqr}}{r}. \quad (B.3)$$

Функция с асимптотическим поведением вида (B.3) обращается в нуль в пределе $r\to\infty$ при условии

$$\operatorname{Im} q = \varkappa > 0, \quad (B.4)$$

что считаем выполненным.

Для собственных функций с комплексной энергией может быть установлен ряд соотношений, по форме совпадающих с соответствующими равенствами при $\varepsilon < 0$ и $\varepsilon > 0$. Так, обычным образом убеждаемся, что функции $\bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r})$ и $\bar\varphi_\mu(q;\mathbf{r})$ ортогональны с весом $v(\mathbf{r})$, если $\bar\alpha_\nu(q) \neq \bar\alpha_\mu(1)$. Поэтому соотношение ортонормированности имеет вид

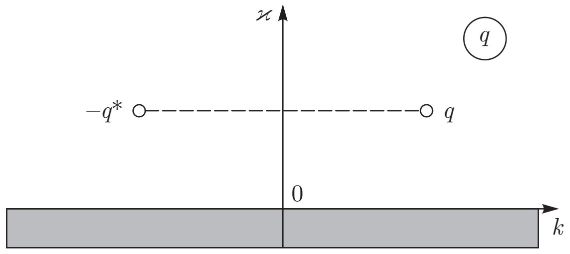
$$\int \bar\varphi_\mu(q;\mathbf{r})\,\bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r})\,v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}. \quad (B.5)$$

Сделаем теперь существенное допущение, что система собственных функций полна и при комплексной энергии, так что выполняется соотношение

$$v(\mathbf{r})\sum_\nu \bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r})\,\bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (B.6)$$

Интегральное уравнение для функции $\bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r})$ в данном случае имеет вид

$$\bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r}) = -\frac{\bar\alpha_\nu(q)}{4\pi}\times \\ \times\int \frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,\bar\varphi_\nu(q;\mathbf{r}')\,v(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'. \quad (B.7)$$




Отсюда следует асимптотическое выражение для $\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})$:

$$r \to \infty: \quad \bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r}) \approx -\frac{\bar{\alpha}_\nu(q)\,\bar{u}_\nu(\mathbf{n},q)}{4\pi}\,\frac{e^{iqr}}{r}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \tag{B.8}$$

$$\bar{u}_\nu(\mathbf{n},q) = \int e^{-iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'}\,\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r}')\,v(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'. \tag{B.9}$$

Величины $\bar{u}_\nu(-\mathbf{n},q)$ являются коэффициентами разложения функции $\exp(iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})$ по системе $\{\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})\}$:

$$e^{iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_\nu \bar{u}_\nu(-\mathbf{n},q)\,\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r}). \tag{B.10}$$

Случай центрально-симметричных потенциалов при $\varepsilon = q^2$ рассматривается аналогичным образом. Соответствующие результаты следуют из соотношений, полученных в разд. 3, при замене $k \to q$.

**2.** Введенные выше функции $\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})$ (как и собственные значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$ ) определены, таким образом, на всей верхней полуплоскости комплексной переменной $q$ — см. рисунок. При переходе от $q$ к $\varepsilon(q) = q^2$ эта полуплоскость разворачивается в целую плоскость комплексной энергии, разрезанную вдоль положительной действительной полуоси. Подобная плоскость (при условии $\operatorname{Im}\sqrt{\varepsilon} = \operatorname{Im} q > 0$ или, что то же, $\operatorname{Re}\sqrt{-\varepsilon} > 0$) представляет собой физический лист соответствующей римановой поверхности комплексной энергии [1]. Нижняя полуплоскость ($\operatorname{Im} q < 0$) при переходе от $q$ к $\varepsilon$ разворачивается во второй, нефизический, лист этой поверхности.

Результаты решения задачи в области комплексных энергий обобщают полученные ранее при отрицательных и положительных $\varepsilon$. Выражения для собственных значений и собственных функций при $\varepsilon < 0$ и $\varepsilon > 0$ следуют из формул для комплексных $\varepsilon$ в соответствующих предельных случаях. Так,

$$\alpha_\nu(\varkappa) = \bar{\alpha}_\nu(i\varkappa), \quad \varphi_\nu(\varkappa;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(i\varkappa;\mathbf{r}), \tag{B.11}$$

$$\alpha_\nu^{(+)}(k) = \bar{\alpha}_\nu(k+i0), \quad \varphi_\nu^{(+)}(k;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(k+i0;\mathbf{r}), \tag{B.12}$$

$$\alpha_\nu^{(-)}(k) = \bar{\alpha}_\nu(-k+i0), \quad \varphi_\nu^{(-)}(k;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(-k+i0;\mathbf{r}). \tag{B.13}$$

Отметим, что как функции энергии $\varepsilon = k^2 > 0$ величины $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ и $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ определены на верхнем берегу разреза на физическом листе, а $\alpha_\nu^{(-)}(k)$ и $\varphi_\nu^{(-)}(\mathbf{r})$ — на нижнем. Соответственно $\alpha_\nu(\varkappa)$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ определены на отрицательной вещественной полуоси этого листа.

С другой стороны, собственные значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$ и собственные функции $\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})$ могут быть определены на всей полуплоскости $\operatorname{Im} q > 0$ (т. е. на всем физическом листе комплексной энергии) по их известным предельным выражениям при $\varepsilon < 0$ или $\varepsilon > 0$ с помощью аналитического продолжения.

Заметим, что для $\bar{\alpha}_\nu(q)$ и $\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})$ имеют место соотношения симметрии, связывающие эти величины при $q = k + i\varkappa$ и $-q^* = -k + i\varkappa$:

$$\bar{\alpha}_\nu(-q^*) = \bar{\alpha}_\nu^*(q), \quad \bar{\varphi}_\nu(-q^*;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu^*(q;\mathbf{r}). \tag{B.14}$$

Действительно, согласно [9] зависимость $\bar{\alpha}_\nu(q)$ от $q$ имеет следующий вид:

$$\bar{\alpha}_\nu(q) = a_\nu(q) + iqb_\nu(q). \tag{B.15}$$

Разложение функций $a_\nu(q)$ и $b_\nu(q)$ идет по четным степеням $q$ с действительными коэффициентами, так что $a_\nu(-q^*) = a_\nu^*(q)$ и $b_\nu(-q^*) = b_\nu^*(q)$. Поэтому, проведя в (B.15) замену $q \to -q^*$, придем к первому соотношению (B.14).

Проведем такую же замену в (B.2) и сравним полученное равенство с комплексно сопряженным уравнением (B.2). Из этого сравнения следует, что одному и тому же собственному значению $\bar{\alpha}_\nu^*(q)$ отвечают две собственные функции, $\bar{\varphi}_\nu(-q^*;\mathbf{r})$ и $\bar{\varphi}_\nu^*(q;\mathbf{r})$. В отсутствие вырождения эти функции могут различаться только постоянным множителем. Из условия нормировки (B.5) следует, что этот коэффициент равен $\pm 1$. Выбираем $+1$, так как в этом случае при $q = i\varkappa$ собственная функция $\varphi_\nu(\varkappa;\mathbf{r})$ будет, как и должно быть, вещественной. Таким образом, второе равенство (B.14) также имеет место. В пределе $q \to k + i0$ из (B.14) следуют соотношения (56).

Умножим уравнение (B.2) на $\bar{\varphi}_\nu^*(q;\mathbf{r})$ и проинтегрируем по всему пространству. В результате для $\bar{\alpha}_\nu(q)$ получим выражение, из которого следует

$$\operatorname{Im}\bar{\alpha}_\nu(q) = 2k\varkappa \int |\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})|^2\,d\mathbf{r} \times \times \left[\int |\bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})|^2\,v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}\right]^{-1}. \tag{B.16}$$

Согласно (B.16), для рассматриваемых $v(\mathbf{r}) > 0$ имеем $\operatorname{Im}\bar{\alpha}_\nu(q) > 0$ при $k > 0$ и $\operatorname{Im}\bar{\alpha}_\nu(q) < 0$ при $k < 0$.

В общем случае $k \neq 0$ и $\varkappa \neq 0$ величина (B.16) отлична от нуля. При $k \to 0$ в собственных функциях из (B.16) следует положить $q = i\varkappa$. В результате выражение (B.16) с учетом условия нормировки (3) и соотношения (7) принимает вид

$$\operatorname{Im}\bar{\alpha}_\nu(q) \approx 2k\varkappa \left.\frac{d\alpha_\nu}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=-\varkappa^2} = -k\frac{d\alpha_\nu(\varkappa)}{d\varkappa}. \qquad (B.17)$$

В пределе $k \to 0$ выражение (B.17) обращается в нуль, как это и должно быть в области отрицательных энергий. Если же $\varkappa \to 0$, то мнимая часть $\bar{\alpha}_\nu(q)$ остается конечной, отличной от нуля, величиной. Действительно, в пределе $\varkappa \to 0$ интеграл в числителе выражения (B.16) расходится при $r \to \infty$ и его вычисление с использованием асимптотики (B.8) приводит к формуле (66), откуда следует, что $\operatorname{Im}\bar{\alpha}_\nu(k) = \operatorname{Im}\alpha_\nu^{(+)}(k) \neq 0$ при всех $k \neq 0$.

Таким образом, мнимая часть собственного значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$ отлична от нуля на всем физическом листе комплексной энергии за исключением отрицательной вещественной полуоси плоскости $\varepsilon$. Соответственно на полуплоскости $\operatorname{Im} q = \varkappa > 0$ величина $\operatorname{Im}\bar{\alpha}_\nu(q)$ обращается в нуль только на положительной мнимой полуоси.

**3.** Эти заключения подтверждаются на конкретных примерах. Так, для $v(r) = 1/\operatorname{ch}^2\gamma r$ собственные значения $s$-состояний (при $l = 0$) находятся в явном виде — см. формулу (91) из работы [6], где следует сделать замену $\varkappa \to -iq$:

$$\bar{\alpha}_{0n}(q) = -\gamma^2\left(2n+1-i\frac{q}{\gamma}\right)\left(2n+2-i\frac{q}{\gamma}\right), \qquad (B.18)$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$ Явное выражение для собственного значения позволяет (с помощью аналитического продолжения) исследовать его свойства и в нижней полуплоскости $\operatorname{Im} q < 0$. Положив в (B.18) $q = k+i\varkappa$, для $\operatorname{Im}\bar{\alpha}_{0n}(q)$ получим

$$\operatorname{Im}\bar{\alpha}_{0n}(q) = k\left[(4n+3)\gamma + 2\varkappa\right], \qquad (B.19)$$

откуда следует, что в комплексной плоскости $q$ величина $\operatorname{Im}\bar{\alpha}_{0n}(q)$ обращается в нуль на всей мнимой оси ($\operatorname{Re} q = k = 0$), а также на серии прямых, параллельных действительной оси и расположенных в нижней полуплоскости при $\operatorname{Im} q = \varkappa = -\gamma(4n+3)/2 < 0$. На этих прямых $\operatorname{Re}\bar{\alpha}_{0n}(q) = (\gamma^2/4) + k^2 > 0$.

Отметим, что обобщение метода квантования потенциала на случай комплексных энергий не только позволяет исследовать аналитические свойства амплитуды рассеяния и других величин, но и открывает возможность решения некоторых нестационарных задач с помощью, например, преобразования Лапласа.

## ПРИЛОЖЕНИЕ C

Для вывода соотношения ортонормированности для системы функций $\left\{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\right\}$ умножим уравнение

$$\nabla^2\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) + k^2\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \alpha\, v(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \qquad (C.1)$$

на $\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})$, затем вычтем из него уравнение для $\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})$, умноженное на $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, и проинтегрируем по всему пространству. В результате получим

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} = \lim_{r\to\infty}\left\{\frac{r^2}{(k')^2-k^2}\times\right.$$
$$\times\int\left[\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})\,\frac{\partial\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})}{\partial r} - \right.$$
$$\left.\left. - \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\,\frac{\partial\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})}{\partial r}\right]d\mathbf{m}\right\}, \qquad (C.2)$$

где $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$. Подстановка в равенство (C.2) соответствующих асимптотик вида (89) дает

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} = W_1 + W_2 + W_3 + W_4. \qquad (C.3)$$

Здесь

$$W_1 = i\lim_{r\to\infty}\left\{\frac{r^2}{(k')^2-k^2}\times\right.$$
$$\left.\times\int\left[(\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}) + (\mathbf{k}'\cdot\mathbf{m})\right]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\,d\mathbf{m}\right\}, \qquad (C.4)$$

$$W_2 = i\lim_{r\to\infty}\left\{\frac{r}{(k')^2-k^2}\times\right.$$
$$\left.\times\int\left[k + (\mathbf{k}'\cdot\mathbf{m})\right]f(\mathbf{n},\mathbf{m})\,e^{ikr}\,e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\,d\mathbf{m}\right\}, \qquad (C.5)$$

$$W_3 = i\lim_{r\to\infty}\left\{\frac{r}{(k')^2-k^2}\times\right.$$
$$\left.\times\int\left[(\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}) + k'\right]f^*(\mathbf{n}',\mathbf{m})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{-ik'r}\,d\mathbf{m}\right\}, \qquad (C.6)$$

$$W_4 = i\left[\int f(\mathbf{n},\mathbf{m})\,f^*(\mathbf{n}',\mathbf{m})\,d\mathbf{m}\right]\times$$
$$\times\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'-k)r}}{k'-k}. \qquad (C.7)$$

Используя асимптотику (83) для $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ и аналогичное выражение для $e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$, получим

$$W_1 = \frac{8\pi^2}{k'k}\left\{\lim_{r\to\infty}\frac{\sin(k'-k)r}{k'-k}\,\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}') - \right.$$
$$\left. - \lim_{r\to\infty}\frac{\sin(k'+k)r}{k'+k}\,\delta(\mathbf{n}+\mathbf{n}')\right\}. \quad (C.8)$$

В выражении (C.8) первый предел, как известно, равен $\pi\,\delta(k-k')$, а второй, представляющий собой бесконечно быстро осциллирующую функцию, следует считать равным нулю. Поэтому

$$W_1 = (2\pi)^3\,\frac{\delta(k-k')}{k^2}\,\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}') =$$
$$= (2\pi)^3\,\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \quad (C.9)$$

Подстановка асимптотики функции $e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$ в (C.5) дает

$$W_2 = -\frac{2\pi}{k'}\left\{f(\mathbf{n},\mathbf{n}')\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'-k)r}}{k'-k} + \right.$$
$$\left. + f(\mathbf{n},-\mathbf{n}')\lim_{r\to\infty}\frac{e^{i(k'+k)r}}{k'+k}\right\}. \quad (C.10)$$

Второй предел здесь должен быть отброшен, так что

$$W_2 = -\frac{2\pi}{k'}\,f(\mathbf{n},\mathbf{n}')\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'-k)r}}{k'-k}. \quad (C.11)$$

Аналогичным образом находим

$$W_3 = \frac{2\pi}{k}\left\{f^*(\mathbf{n}',\mathbf{n})\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'-k)r}}{k'-k} + \right.$$
$$\left. + f^*(\mathbf{n}',-\mathbf{n})\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'+k)r}}{k'+k}\right\}. \quad (C.12)$$

Отсюда, опустив равный нулю второй предел, получаем

$$W_3 = \frac{2\pi}{k}\,f^*(\mathbf{n}',\mathbf{n})\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'-k)r}}{k'-k}. \quad (C.13)$$

Таким образом,

$$W_2+W_3+W_4 = -2\pi\left[\frac{1}{k'}f(\mathbf{n},\mathbf{n}') - \frac{1}{k}f^*(\mathbf{n}',\mathbf{n}) - \right.$$
$$\left. - \frac{i}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\mathbf{m})\,f^*(\mathbf{n}',\mathbf{m})\,d\mathbf{m}\right]\times$$
$$\times\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'-k)r}}{k'-k}. \quad (C.14)$$

В равенстве (C.14) существенны $k'\approx k$. Разложение по степеням $k'-k$ дает

$$W_2+W_3+W_4 = -\frac{2\pi}{k}\left[f(\mathbf{n},\mathbf{n}') - f^*(\mathbf{n}',\mathbf{n}) - \right.$$
$$\left. - \frac{ik}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\mathbf{m})\,f^*(\mathbf{n}',\mathbf{m})\,d\mathbf{m}\right]\times$$
$$\times\lim_{r\to\infty}\frac{e^{-i(k'-k)r}}{k'-k} + \ldots \quad (C.15)$$

Здесь выражение в квадратных скобках равно нулю в силу выполнения соотношения унитарности (102). Следующие члены разложения содержат $e^{-i(k'-k)r}$ без разности $k'-k$ в знаменателе и в пределе $r\to\infty$ обращаются в нуль. Таким образом,

$$W_2+W_3+W_4 = 0\,, \quad (C.16)$$

так что из равенства (C.3) с учетом (C.9) следует соотношение ортонормированности для системы $\{\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$:

$$\int \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\psi^{(+)*}_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\,d\mathbf{r} = (2\pi)^3\,\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \quad (C.17)$$

Отметим, что в случае центрально-симметричного потенциала для системы радиальных функций $\{\psi^{(+)}_{kl}(r)\}$, определенных согласно (96), из (C.17) получаем соотношение ортонормированности в следующем виде:

$$\int\limits_0^\infty \psi^{(+)}_{kl}(r)\,\psi^{(+)*}_{k'l}(r)\,r^2\,dr = \frac{\pi}{2}\,\frac{\delta(k-k')}{k^2}. \quad (C.18)$$

При выводе равенства (C.18) использовались соотношения ортонормированности (31) и полноты (32) для системы сферических функций $\{Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n})\}$.

## ЛИТЕРАТУРА


1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
2. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, Мир, Москва (1969).
3. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, Мир, Москва (1969).
4. S. Weinberg, Phys. Rev. **131**, 440 (1963).
5. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **126**, 986 (2004).
6. B. Ya. Balagurov, J. Comp. Methods in Sciences and Engineering **10**, №№ 4–6, 105 (2010).
7. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. II, Наука, Москва (1974).
8. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
9. Б. Я. Балагуров, *Квантование потенциала в уравнении Шрёдингера*, URSS, Москва (2018).