Семинар 10. Теория рассеяния и функция Грина

Побойко Игорь

11 февраля 2017 г.

Постановка задачи рассеяния

Ранее, на третьем семинаре, мы уже сталкивались с одномерной задачей рассеяния. В ней мы искали решения уравнения Шрёдингера в некотором (локализованном) потенциале $U(x)$, имеющие следующие асимптотики вдали от рассеивающего центра (при $x \to \pm\infty$), включающей в себя падающие, отражённые, и прошедшие волны:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x \to -\infty \\ te^{ikx}, & x \to +\infty \end{cases} \tag{1}$$

Такая постановка непосредственно обобщается на пространство произвольной размерности. В рамках этого семинара будет рассмотрен трёхмерный случай. Пусть имеется локализованный рассеивающий потенциал $V(\boldsymbol{r})$; мы будем искать решения стационарного уравнения Шрёдингера $\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$, имеющие следующий асимптотический вид:

$$\boxed{\psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{kr}} + f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}')\frac{e^{ikr}}{r}, \quad r \to \infty}, \quad \boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{k}}{k}, \quad \boldsymbol{n}' = \frac{\boldsymbol{r}}{r}, \quad E = \frac{k^2}{2m}. \tag{2}$$

Направление $\boldsymbol{n}$ соответствует направлению падающей волны $e^{i\boldsymbol{kr}}$, а $\boldsymbol{n}'$ — направлению на наблюдателя в точке $\boldsymbol{r}$ (направление рассеянной волны). Данный вид волновой функции представляет собой первые два члена асимптотического разложения по $\frac{1}{r}$, поэтому, вообще говоря дальше будут иметься члены $O(\frac{1}{r^2})$, но в рамках задачи рассеяния они нас не будут интересовать.

По аналогии с тем, как в одномерной задаче необходимо было найти величины (t, r) — амплитуды прохождения и отражения, так и в трёхмерной задаче необходимо искать неизвестную функцию $f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}')$, которая носит название *амплитуды рассеяния*. Несложно видеть, что она имеет размерность длины, и зависит в случае общего положения от направления обоих векторов[1]; однако в случае сферической симметрии потенциала, можно заметить, что амплитуда рассеяния может зависеть только от *угла рассеяния* — угла θ между векторами $\boldsymbol{n}$ и $\boldsymbol{n}'$:

$$f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}') \equiv f(\theta), \quad \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n}' = \cos\theta. \tag{3}$$

Потоки и сечение рассеяния Тот факт, что рассеянная волна содержит именно $\frac{1}{r}$ связан с сохранением потока вероятности в телесный угол в трёхмерном пространстве[2]. Действительно, используя известную формулу из третьего семинара для потока частиц, в ведущем по $\frac{1}{r}$ приближении можно вычислить плотности потока частиц в падающей и рассеянной волне:

$$\boldsymbol{j}_{\text{пад}} = \frac{1}{m}\boldsymbol{k}, \quad \boldsymbol{j}_{\text{расс}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{m}\frac{|f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}')|^2}{r^2}\boldsymbol{k}', \tag{4}$$

где $\boldsymbol{k}' = k \cdot \boldsymbol{n}'$ — волновой вектор рассеянной волны. В таком случае поток частиц через некоторый телесный угол $d\Omega$ равен $dN_{\text{расс}} = \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{n}' dS = \frac{1}{m}|f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}')|^2 k d\Omega$ — видно, что расстояние r из асимптотики волновой функции сократилось с $dS = r^2 d\Omega$; именно поэтому асимптотика волновых функций имеет именно такой вид. Наконец, по аналогии с классической механикой, можно ввести *дифференциальное сечение рассеяния*, которое определяется как отношение числа рассеявшихся частиц в единицу времени к плотности потока налетающих частиц:

$$\boxed{d\sigma = \frac{dN_{\text{расс}}}{j_{\text{пад}}} = |f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}')|^2 d\Omega_{\boldsymbol{n}'} = 2\pi|f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta}. \tag{5}$$

[1] Хотя уже в случае общего положения она обладает определённым набором симметрий; в частности, с унитарностью рассеяния связано соотношение $f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}') = f(-\boldsymbol{n}', -\boldsymbol{n})$.

[2] В двумерном случае множитель был бы $\frac{1}{\sqrt{r}}$, а в одномерном его, как несложно видеть, вообще нет

Величину $\sigma = \int d\sigma$ называют *полным сечением рассеяния*[3]. Кроме того, в приложениях[4] часто встречается так называемое *транспортное сечение рассеяния*, определяемое согласно:

$$\sigma_{\mathrm{tr}} = \int (1 - \cos\theta) d\sigma \tag{6}$$

Величина сечения рассеяния носит размерность $[\sigma] = m^2$. Дальнейшее построение теории рассеяния сводится к изучению методов вычисления амплитуды рассеяния.

Функция Грина и теория возмущений

В случае слабого (дальше будет пояснено, в каком смысле слабого) потенциала, амплитуду рассеяния можно находить, используя теорию возмущений. Пусть $|\psi\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + |\chi\rangle$ — искомая волновая функция задачи рассеяния ($|\boldsymbol{k}\rangle$ — падающая плоская волна, а $|\chi\rangle$ — рассеянная). Путём тождественных преобразований перепишем уравнение Шрёдингера (учитывая, что $\hat{H}_0 |\boldsymbol{k}\rangle = E |\boldsymbol{k}\rangle$, $E = \frac{k^2}{2m}$):

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(|\boldsymbol{k}\rangle + |\chi\rangle) = E(|\boldsymbol{k}\rangle + |\chi\rangle) \Rightarrow (E - \hat{H}) |\chi\rangle = \hat{V} |\boldsymbol{k}\rangle \tag{7}$$

Таким образом, если мы научимся обращать оператор $(E - \hat{H})$, то формальное решение этого уравнение можно записать как $|\chi\rangle = (E - \hat{H})^{-1} \hat{V} |\boldsymbol{k}\rangle$.

Резольвента (функция Грина) Объект, с которым мы столкнулись только что, носит название *резольвенты оператора* $\hat{H}$, или *функцией Грина* оператора $\hat{H}$[5], и обозначается следующим образом:

$$(E - \hat{H})\hat{G}_E = \hat{\mathbb{I}}, \quad \hat{G}_E = (E - \hat{H})^{-1} \tag{8}$$

Давайте изучим его свойства. Пусть $\{|n\rangle, E_n\}$ образуют дискретный спектр гамильтониана. Тогда для функции Грина тривиальным образом можно записать следующее представление:

$$\hat{G}_E = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n} \tag{9}$$

Во-первых, это выражение означает, что на комплексной плоскости параметра энергии E, оператор $\hat{G}_E$ содержит полюса; вычеты в этих полюсах дают проекторы на собственные подпространства гамильтониана. Рассматривая предельный переход к непрерывному спектру, можно понять, что ему соответствует разрез; это будет продемонстрировано ниже на примере функции Грина свободной частицы. Во-вторых, с его помощью можно строить теорию возмущений; действительно, пусть функция Грина невозмущенного гамильтониана известна $\hat{G}_E^{(0)} = (E - \hat{H}_0)^{-1}$. В таком случае, полную функцию Грина можно записать в виде ряда теории возмущений:

$$\boxed{\hat{G}_E = (E - \hat{H}_0 - \hat{V})^{-1} = \hat{G}_E^{(0)} + \hat{G}_E^{(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{(0)} + \hat{G}_E^{(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{(0)} \hat{V} \hat{G}_E^{(0)} + \ldots.} \tag{10}$$

Координатное представление С абстрактными операторами работать не очень удобно, поэтому введём функцию Грина в координатном представлении $G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \langle \boldsymbol{r}| \hat{G}_E |\boldsymbol{r}'\rangle$. Несложно видеть, что она удовлетворяет следующему уравнению:

$$(E - \hat{H}) G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{11}$$

(при этом оператор $\hat{H} = -\frac{\nabla_{\boldsymbol{r}}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r})$ действует на аргумент $\boldsymbol{r}$ функции Грина). Функция Грина очевидным образом определена неоднозначно: если к ней добавить произвольное решение однородного уравнения (например, плоскую волну), то она по-прежнему будет удовлетворять этому уравнению (это непосредственно связано с аналитической структурой функции Грина — непосредственно на энергиях, где такое решение однородного уравнения существует, она имеет либо полюса, либо разрез). В координатном представлении, <u>точное</u> уравнение, определяющее рассеянную волну, записывается следующим образом:

$$\chi(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}' G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') V(\boldsymbol{r}') e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'} \tag{12}$$

[3] В случаях, если потенциал достаточно сильный или дальнодействующий (примером такого потенциала может являться Кулоновский потенциал $U(r) = \frac{e^2}{r}$), полное сечение рассеяния вполне может обращаться в бесконечность; ничего страшного в этом нет

[4] Как правило, в приложениях, связанных с переносом и релаксацией импульса — а именно, при вычислении электрической проводимости или теплопроводности

[5] Часто функцией Грина называют координатное представление резольвенты, то есть функцию $G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \langle \boldsymbol{r}| \hat{G}_E |\boldsymbol{r}'\rangle$; однако мы будем использовать эти определения как взаимозаменяемые

Функция Грина свободной частицы Давайте определим функцию Грина для свободной частицы $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$; и на этом простом, но тем не менее важном примере продемонстрируем основные свойства функции Грина. В силу трансляционной инвариантности, функция Грина для свободной частицы является функцией лишь разности координат $G_E^{(0)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \equiv G_E^{(0)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$. Для её нахождения, воспользуемся известным полным набором собственных функций гамильтониана $\hat{H}_0$ — набором плоских волн $\langle \boldsymbol{r} | \boldsymbol{k} \rangle = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$, нормированных условием $\left\langle \boldsymbol{k} | \boldsymbol{k}' \right\rangle = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')$ — и формулой (9):

$$G_E^{(0)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{E - \frac{k^2}{2m}} \tag{13}$$

Тут мы немедленно сталкиваемся с проблемой, а именно: при $E > 0$ этот интеграл не определён, потому что в области интегрирования имеется неинтегрируемая особенность при $E = \frac{k^2}{2m}$. Это полностью согласуется со сделанным выше утверждением, что в области непрерывного спектра функция Грина содержит разрез, и на самом разрезе она плохо определена. Функция Грина на верхнем берегу разреза, при $E = E + i0$, уже определена хорошо и носит название *запаздывающей (retarded)* функцией Грина, а на нижнем берегу — *опережающей (advanced)* функцией Грина. Это связано с тем, что преобразование Фурье по энергии — функция $G(t, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \int \frac{dE}{2\pi} G_E(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') e^{-iEt}$ является *пропагатором*[6] временного уравнения Шрёдингера $i\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}\,|\psi\rangle$; и запаздывающей функции Грина соответствует пропагатор $G^R(t < 0) \equiv 0$, а опережающей — $G^A(t > 0) \equiv 0$.

Для нахождения запаздывающей функции Грина можно поступить следующим образом: рассмотреть её на отрицательной энергии $G_{E<0}$, где интеграл определён хорошо, а затем аналитически продолжить его либо на верхний, либо на нижний берег разреза. Однако мы поступим более прямолинейно:

$$\begin{aligned} G_E^{(0,R)}(\boldsymbol{r}) = \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{E + i0 - \frac{k^2}{2m}} = \frac{m}{2\pi^2} \int_0^\infty k^2 dk \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{e^{ikr\cos\theta}}{k_E^2 - k^2 + i0} = \\ = \frac{m}{2\pi^2 ir} \int_0^\infty k dk \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{k_E^2 - k^2 + i0} = \frac{m}{2\pi^2 ir} \int_{-\infty}^\infty \frac{k}{k_E^2 - k^2 + i0} e^{ikr} dk \end{aligned} \tag{14}$$

Полученное выражение имеет полюса при $k = \pm(k_E + i0)$. При $r > 0$, контур интегрирования замыкается в верхней комплексной полуплоскости, и вклад в интеграл даёт единственный полюс $k = k_E + i0$. Используя теорему о вычетах (а заодно, восстанавливая $\hbar$ по размерности, поскольку это важный результат):

$$\boxed{G_E^{(0,R)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_E r}}{r}, \quad k_E = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}} \tag{15}$$

Во-первых, отметим, что действительно у этой функции как функции параметра E имеется разрез (для определения неоднозначной функции $\sqrt{E}$). Путём аналитического продолжения тривиально заметим, что на нижнем берегу разреза функция Грина (опережающая) равна:

$$\boxed{G_E^{(0,A)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-ik_E r}}{r}} \tag{16}$$

Во-вторых, запаздывающая функция Грина соответствует расходящейся волне, а опережающая — сходящейся. Поэтому для решения задачи рассеяния необходимо использовать именно запаздывающую функцию Грина.

Борновское приближение Пусть потенциал имеет характерную глубину V_0 и пространственный масштаб a; и в определённом смысле мы будем считать его малым, так чтобы можно было пользоваться первым порядком теории возмущений. Оставляя в ряду (10) лишь первый член, для рассеянной волны (12) мы получаем:

$$\chi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi} \int d\boldsymbol{r}' \frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} V(\boldsymbol{r}') e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'} \tag{17}$$

Поскольку нас интересует лишь асимптотическое поведение этой волновой функции вдали от рассеивателя, $r \to \infty$; а величина $|\boldsymbol{r}'| \lesssim a$, то мы можем разложить в знаменателе $|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'| \approx r$; в числителе, поскольку мы имеем дело с фазой, нужно разложить чуть точнее: $|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'| \approx r - \boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{n}'$ (напомним, $\boldsymbol{n}' = \frac{\boldsymbol{r}}{r}$):

$$\chi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d\boldsymbol{r}' V(\boldsymbol{r}') e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}'} \tag{18}$$

Полученное решение имеет ровно необходимый вид. Тем самым, амплитуда рассеяния равна:

$$\boxed{f(\theta) = -\frac{m}{2\pi} V_{\boldsymbol{q}}}, \tag{19}$$

[6] Для нас это будет ещё одним синонимом функции Грина

где $V_{\boldsymbol{q}}$ — Фурье-компонента потенциала, на волновом векторе $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$; несложно видеть, что этот волновой вектор соответствует переданному от потенциала частице импульсу при акте рассеяния; при этом $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$. Эта формула носит название формулы Борна. Критерии её применимости можно понять из условия, что волновая функция $\chi^{(1)}(\boldsymbol{r})$ должна во всём пространстве (в том числе и в области рассеивателя!) быть меньше нулевого приближения — падающей волны $e^{i\boldsymbol{kr}}$. Если мы так поступим, мы получим два условия (достаточно выполнения одного из них):

$$V_0 \ll \frac{1}{ma^2}, \quad \text{или} \quad V_0 \ll \frac{1}{ma^2} \cdot ka$$

Первое условие означает мелкость ямы, и мы с ним уже сталкивались. Второй же критерий говорит, что потенциал не обязательно должен быть слабым, но тогда частицы должны быть быстрыми: $ka \gg 1$ (или, эквивалентно $E \gg \frac{1}{ma^2}$).

Обсудим ещё некие общие свойства рассеяния, которые применимы не только к слабым потенциалам, но на примере которого их можно проследить. Во-первых, если частицы медленные (то есть $ka \ll 1$), то $V_{\boldsymbol{q}} \approx V_0$; зависимость от θ пропадает, и, значит, медленные частицы рассеиваются изотропно (или, говорят, рассеяние происходит в s-канале. Смысл этих слов будет понятен на следующем семинаре). С другой стороны, если частицы быстрые $ka \gg 1$, то, поскольку типичные значения $q \sim \frac{1}{a}$, то характерные углы рассеяния оказываются малыми $\theta \lesssim \frac{1}{ka}$. Таким образом, быстрые частицы рассеиваются слабо (что интуитивно понятно из квазиклассических соображений — ведь быстрые частицы пролетают «быстро», и не успевают «почувствовать» потенциал).

Золотое правило Ферми Тот факт, что амплитуда рассеяния получилась пропорциональной Фурье-компоненте потенциала — это общее свойство Борновского приближения в пространстве любой размерности (все вышеприведённые рассуждения использовали трёхмерность пространства. Выражение в Борновском приближении для дифференциального сечения рассеяния можно вывести и иначе, используя золотое правило Ферми (семинар 5, переходы в непрерывном спектре). Если в качестве исходного состояния мы возьмём падающую волну $|i\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle$, а в качестве конечного — рассеянную волну $|f\rangle = |\boldsymbol{k}'\rangle$, то матричный элемент возмущения как раз равен $V_{fi} \equiv V_{\boldsymbol{q}}$; и тогда золотое правило Ферми говорит, что количество переходов в единицу времени будет даваться:

$$dN_{\text{расс}} \equiv d\omega_{i\to f} = 2\pi |V_{\boldsymbol{q}}|^2 \delta\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k'^2}{2m}\right) \frac{d^d\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^d} = \frac{mk'^{d-2}}{(2\pi)^{d-1}} |V_{\boldsymbol{q}}|^2 \delta\left(k - k'\right) dk' d\Omega \tag{20}$$

Наконец, интегрируя по модулю импульса конечных состояний и деля на плотность потока частиц в падающей волне $\boldsymbol{j}_{\text{пад}} = \frac{\boldsymbol{k}}{m}$, мы немедленно получаем дифференциальное сечение рассеяния в пространстве произвольной размерности:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2 k'^{d-3}}{(2\pi)^{d-1}} |V_{\boldsymbol{q}}|^2} \tag{21}$$

В частности, при $d = 3$, несложно видеть, $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2}|V_{\boldsymbol{q}}|^2 \equiv |f(\theta)|^2$, где $f(\theta)$ даётся формулой Борна (19).

Пример решения задачи

В качестве примера решения задачи, рассмотрим в рамках Борновского приближения рассеяние на трёхмерном потенциале $V(\boldsymbol{r}) = V_0 e^{-r^2/a^2}$. Его Фурье-гармоника даётся:

$$V_{\boldsymbol{q}} = V_0 \int d\boldsymbol{r} e^{-r^2/a^2 + i\boldsymbol{qr}} = V_0 \int d\boldsymbol{r} e^{-\frac{1}{a^2}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{q}a^2/2)^2 - q^2a^2/4} = \pi^{3/2} V_0 a^3 e^{-q^2a^2/4}$$

Заметим, что $q^2 = 4k^2\sin^2\frac{\theta}{2} = 2k^2(1-\cos\theta)$; поэтому амплитуда рассеяния равна:

$$f(\theta) = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} V_0 m a^3 e^{-q^2a^2/4} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} V_0 m a^3 e^{-k^2a^2(1-\cos\theta)/2}$$

Наконец, для вычисления сечения рассеяния удобно заметить (это стандартный трюк для трёхмерья!), что $\sin\theta d\theta = d(1-\cos\theta) = \frac{d(q^2)}{2k^2}$. Поэтому полное сечение рассеяния равно:

$$\sigma = \frac{\pi^2}{4}\frac{m^2a^6V_0^2}{k^2}\int_0^{4k^2} d(q^2) e^{-q^2a^2/4} = \frac{\pi^2 m^2 a^4 V_0^2}{k^2}(1 - e^{-k^2a^2})$$

Для медленных частиц $ka \ll 1$ это даёт $\sigma_{slow} \approx \left(\frac{\pi V_0}{1/ma^2}\right)^2 a^2 \ll a^2$, а для быстрых — $\sigma_{fast} \approx \left(\frac{\pi V_0}{1/ma^2}\right)^2 \frac{1}{k^2} \ll \sigma_{slow}$. В полном согласии с интуицией, быстрые частицы рассеиваются гораздо слабее (сечение меньше в $k^2a^2 \gg 1$ раз); а сечение медленных частиц оказывается независящим от энергии. Ну и в обоих случаях рассеивание оказывается слабым (а именно, сечение рассеяния гораздо меньше геометрических размеров рассеивателя a^2).