Семинар 15. Фазовая теория рассеяния

Степанов Николай

14 февраля 2018

Сферическая симметрия и базис сферических волн

В приложениях наиболее часто встречаются сферически симметричные потенциалы $V(r)$; тут и далее мы имеем в виду трёхмерное пространство. Как обычно, наличие сферической симметрии приводит к появлению дополнительного интеграла движения — орбитального момента $\hat{L}^2$, благодаря которому в решении задачи рассеяния можно продвинуться ещё чуть дальше.

Напомним, решение общей задачи рассеяния сводится к нахождению решения стационарного уравнения Шрёдингера, имеющего специального вида асимптотику на больших расстояниях от рассеивателя:

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}), \quad \psi(\boldsymbol{r}) \approx e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} \tag{1}$$

(мы выбрали систему координат так, что падающая волна падает параллельно оси z). Как известно, произвольное решение этого уравнения можно разложить по базису сферических волн $\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\psi_{lm}R_l(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$. Стоит обратить внимание, что конкретно в задаче рассеяния аксиальная симметрия (по углу ϕ) всё ещё имеет место, поэтому разложения будет идти только по сферическим гармоникам $Y_{l0}(\theta)$, которые (с точностью до константы) совпадают с полиномами Лежандра $P_l(\cos\theta)$. Поэтому общий вид такого разложения для задачи рассеяния имеет следующий вид:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) R_{kl}(r). \tag{2}$$

Радиальные волновые функции $R_l(r)$ удовлетворяют следующему уравнению:

$$R''_{kl}(r) + \frac{2}{r}R'_{kl}(r) + \left[k^2 - 2mV(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{kl}(r) = 0 \tag{3}$$

Стандартной подстановкой $R_{kl}(r) = \frac{\chi_{kl}(r)}{r}$ это уравнение сводится к одномерному уравнению Шредингера в потенциале $V_{eff}(r) = \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$; поправка к потенциалу носит название **центробежного потенциала**.

Свободное движение

Сперва исследуем, как решения этого уравнения ведут себя в отсутствии потенциала $V(r) \equiv 0$ (это обсуждалось в 1 упражнении 4 семинара). Например, если $l = 0$, то центробежный потенциал отсутствует, и решение выписывается тривиально: $\chi_{k0}(r) = 2\sin kr \Rightarrow R^{(0)}_{k0}(r) = 2\frac{\sin kr}{r}$ (константа выбрана для согласования обозначений с [ЛЛ, §33 «сферические волны»]).

Для произвольного l подстановкой $R_{kl}(r) = \frac{Q_{kl}(r)}{\sqrt{r}}$ уравнение сводится к уравнению Бесселя с полуцелым индексом $l + \frac{1}{2}$; общий вид решения[1]: $R^{(0)}_{kl}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}}J_{l+1/2}(kr)$. Используя известную асимптотика функций Бесселя на больших расстояниях, мы можем записать:

$$R^{(0)}_{kl}(r) \underset{kr\gg 1}{\approx} \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \tag{4}$$

[1] Вообще говоря, функции Бесселя с полуцелым индексом не являются спецфункциями. Функции $j_l(z) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2z}}J_{l+1/2}(z)$ носят название *сферических функций Бесселя*, и выражаются через элементарные функции — синусы и косинусы. В частности,

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, \quad j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}, \quad \ldots$$

Несвободное движение

В задаче рассеяния нас интересует лишь асимптотика волновой функции вдали от рассеивателя, где $V(r) = 0$. Поэтому при $r \to \infty$ движение можно считать свободным, и полная волновая функция $R_l(r)$ является в общем случае линейной комбинацией функции Бесселя и Неймана. Поэтому общий вид решения точного уравнения Шрёдингера на больших расстояниях имеет следующий вид:

$$\boxed{R_l(r) \underset{r\to\infty}{\approx} \frac{2}{r}\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} \tag{5}$$

Величины δ_l носят название **фазовых сдвигов**. Они определяются видом потенциала $V(r)$, могут зависеть от энергии и всего остального. Вся необходимая информация о задаче рассеяния в заданном потенциале сводится лишь к этому набору чисел; через них можно выразить амплитуды и сечения рассеяния.

Логика дальнейшего рассуждения следующая. Мы раскладываем точное решение уравнения Шрёдингера по базису сферических волн (2). По этому же базису мы раскладываем правую часть равенства (1). Сравнивая асимптотики на бесконечности, считая величины δ_l известными, мы тем самым сможем через них выразить амплитуду $f(\theta)$ и, в конечном итоге, и сечение рассеяния σ.

Разложение плоской волны

Для реализации намеченной схемы, нам необходимо провести разложение плоской волны по сферическим, то есть найти неизвестные коэффициенты B_l в следующем равенстве:

$$e^{ikz} \equiv e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l P_l(\cos\theta) R^{(0)}_{kl}(r) \tag{6}$$

Наиболее простой способ это сделать можно найти в [ЛЛ, §34 «разложение плоской волны»]. Мы разложим левую и правую часть в ряд Тейлора; заметим, что полиномы Лежандра, для которых можно воспользоваться формулой Родрига, имеют вид $P_l(t) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d}{dl}[(t^2-1)^l] = \sum_{n=0}^{l} p_n^{(l)} t^n$ (полином степени l); а для функций Бесселя воспользуемся известным разложением их в ряд. Получаем следующее тождество:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(ikr\cos\theta)^l}{l!} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l \left[\sum_{n=0}^{l} p_n^{(l)} \cos^n\theta\right] \left[\sqrt{\frac{2\pi k}{r}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m+l+\frac{3}{2})}\left(\frac{kr}{2}\right)^{l+\frac{1}{2}+2m}\right] \tag{7}$$

Прелесть этого равенства в том, что в правой части равенства только члены с $n = l$ и $m = 0$ дают вклад в множитель $(r\cos\theta)^l$; а остальные имеют вид $r^n(\cos\theta)^m$ $(n \neq m)$, и, поскольку в левой части таких членов нет, они обязаны сократиться — как именно это происходит нас не сильно интересует. Старший член полиномов Лежандра тоже достаточно легко извлечь, используя всю ту же формулу Родрига и разложение в бином Ньютона; получаем $p_l^{(l)} = \frac{(2l)!}{2^l (l!)^2}$. Наконец, необходимая гамма-функция имеет вид $\Gamma(l+\frac{3}{2}) = \sqrt{\pi}\cdot(2l+1)\cdot\frac{(2l)!}{l! 2^{2l+1}}$. Собирая всё вместе, мы получаем $B_l = \frac{1}{2k}(2l+1)e^{i\pi l/2}$ и тем самым разложение плоской волны имеет следующий вид[2]:

$$\boxed{e^{ikz} = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty} e^{i\frac{\pi l}{2}}(2l+1)P_l(\cos\theta)R_l^{(0)}(r) \underset{kr\gg 1}{\approx} \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty} e^{i\frac{\pi l}{2}}(2l+1)P_l(\cos\theta)\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \tag{8}$$

Тем самым падающая волна в сферическом базисе на самом деле раскладывается по суперпозиции падающих сферических волн e^{ikr}/r и отражённых сферических волн e^{-ikr}/r.

Основные результаты фазовой теории рассеяния

Раскладывая все слагаемые в определении (1) на падающие и отражённые сферические волны, используя разложение (2) и (8), мы получаем следующее равенство:

$$\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}\right] + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} \equiv \frac{1}{ir}\sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta)\left[e^{-i\frac{\pi l}{2}}e^{ikr+i\delta_l} - e^{i\frac{\pi l}{2}}e^{-ikr-i\delta_l}\right] \tag{9}$$

[2]Существует и прямолинейный способ разложения: достаточно домножить левую и правую стороны на соответствующий полином Лежандра и воспользоваться соотношением ортогональности. Получаем интегральное представление для коэффициентов разложения, вычисление которого сводится к одному из интегральных представлений для функции Бесселя.

Приравнивая коэффициенты при падающих волнах e^{-ikr}, мы получим: $A_l = \frac{1}{2k}(2l+1)e^{i\frac{\pi l}{2}}e^{i\delta_l}$. Поэтому, приравнивая теперь коэффициенты при расходящихся волнах, мы получим:

$$\boxed{f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)(e^{2i\delta_l}-1)} \tag{10}$$

Используя свойство ортогональности полиномов Лежандра $\int_0^\pi P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \frac{2}{2l+1}\cdot\delta_{ll'}$, мы можем выразить сечение рассеяния:

$$\boxed{\sigma = \sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l, \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l} \tag{11}$$

Физический смысл этой формулы простой. В случае сферической симметрии, вклады в волновую функцию с различными l рассеиваются независимо; и полное сечение рассеяния является суммой сечений рассеяния в разных **каналах** (вкладов с различными l). Эти каналы рассеяния носят специальные название; в частности, каналы $l = 0, 1, 2, 3$ называют соответственно s-,p-,d-,f-каналами. Тем самым, когда говорят, что «рассеяние происходит в s-канале» — имеют в виду, что наибольший вклад в полное сечение рассеяния вносит парциальное сечение σ_0.

Оптическая теорема Исходя из формул для $f(\theta)$ и σ, можно заметить следующее интересное тождество:

$$\boxed{\mathrm{Im}f(0) = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\cos 2\delta_l) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \equiv \frac{k}{4\pi}\sigma} \tag{12}$$

С этим тождеством — оптической теоремой — мы уже сталкивались на прошлом семинаре в общем случае. Тут же мы продемонстрировали, как оно возникает в рамках фазовой теории рассеяния.

Квазиклассика

Один из способов нахождения фазовых сдвигов — это метод WKB, или же метод квазиклассики, который прекрасно работает в довольно широком классе задач. Действительно, поскольку радиальные волновые функции $\chi_{kl}(r)$ удовлетворяют одномерному уравнению Шрёдингера в потенциале $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{2mr^2}$, для них можно сразу записать квазиклассическое решение:

$$\chi_{kl}(r) \approx \sin\left(\int_{r_0}^{r} dr\sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2mV(r)} + \frac{\pi}{4}\right). \tag{13}$$

Тут точка r_0 является квазиклассической точкой остановки, $E = V_{eff}(r_0)$. Тем самым, можно сразу же записать квазиклассическое выражение для фазовых сдвигов:

$$\boxed{\delta_l = \int_{r_0}^{\infty} dr\left(\sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2mV(r)} - k\right) - kr_0 + \frac{\pi l}{2} + \frac{\pi}{4}} \tag{14}$$

Обратим внимание на следующий факт. Пусть мы рассматриваем рассеяние быстрых частиц на потенциале конечного радиуса $\sim a$, так что $ka \gg 1$. Если бы никакого рассеивателя не было, то квазиклассической точкой остановки была бы $k^2 = \frac{l(l+1)}{r_0^2} \Rightarrow kr_0 \approx (l + \frac{1}{2})$. Если полученная точка остановки $r_0 > a$, то частицы с такими l не будут даже долетать до рассеивателя, и фазовые сдвиги будут экспоненциально подавлены. Тем самым мы заключаем, что рассеяние на быстрых энергиях происходит преимущественно в каналах с $l+\frac{1}{2} \lesssim ka$ (в частности, та же аргументация показывает, что медленные частицы $ka \ll 1$ рассеиваются лишь в s-канале $l = 0$; этот же факт демонстрировался на примере формулы Борна, и, как уже было сказано ранее, он носит совершенно общий характер). Данное утверждение является тривиальным в классической физике: ведь орбитальный момент $L = \hbar l = \hbar k\cdot\rho$, где ρ — прицельный параметр; поэтому это утверждение показывает лишь, что $\rho \lesssim a$, что в классической физике совершенно очевидно.

Если потенциал $|V(r)| \ll E$, то выражение для δ_l можно разложить (при этом все «лишние фазы» снаружи интеграла обязаны сократиться — поскольку при $V(r) \equiv 0$, $\delta_l \equiv 0$):

$$\delta_l \approx -\int_{r_0}^{\infty} dr\frac{mV(r)}{\sqrt{k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}}} \tag{15}$$

Примеры решения задач

Задача 1

Давайте рассмотрим рассеяние медленных частиц на твёрдом шаре радиуса a ($ka \ll 1$), описываемом следующим потенциалом:

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \tag{16}$$

Рассеяние происходит в s-канале, и точное решение уравнения Шрёдингера в s-канале записывается согласно $\chi_0(r) = \sin(k(r-a))$. Тем самым фазовый сдвиг имеет вид $\delta_0 = -ka$, а сечение рассеяния равно:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2(ka) \approx 4\pi a^2 \tag{17}$$

Данное сечение оказывается ровно в 4 раза больше классического сечения рассеяния πa^2; это является следствием волновой природы частиц и дифракционными эффектами.

Задача 2

Другим примером задачи, которая тривиально решается при помощи фазовой теории рассеяния, является задача рассеяния на потенциале $U(r) = \frac{\beta}{2mr^2}$ (для произвольного параметра[3] $\beta > -\frac{1}{4}$). Действительно, в таком случае эффективный потенциал имеет вид $V_{eff}(r) = \frac{\beta + l(l+1)}{2mr^2} \equiv \frac{l_{eff}(l_{eff}+1)}{2mr^2}$, где $l_{eff} = \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \beta} - \frac{1}{2}$; решение уравнения Шрёдингера в таком потенциале выражается через те же сферические функции Бесселя $j_{l_{eff}}(r)$; и тем самым, *точное* выражение для фазовых сдвигов имеет следующий вид:

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}(l_{eff} - l) = -\frac{\pi}{2}\left(\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \beta} - \left(l + \frac{1}{2}\right)\right) \tag{18}$$

Можно исследовать фазы рассеяния в случае слабого потенциала $\beta \ll 1$. При этом $\delta_l \approx -\frac{\pi}{4}\frac{\beta}{l+\frac{1}{2}} \ll 1$, и парциальные сечения рассеяния равны $\sigma_l = \frac{\pi^3\beta^2}{2k^2}\frac{1}{l+\frac{1}{2}} \propto \frac{1}{l}$; а значит, полное сечение $\sigma = \sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l$ расходится. Однако как и в случае рассеяния на кулоновском потенциале можно вычислить дифференциальное сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \approx \frac{1}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty}\delta_l\delta_{l'}(2l+1)(2l'+1)P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) = \frac{\pi^2\beta^2}{4k^2}\left(\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta)\right)^2 \tag{19}$$

Последнюю сумму можно легко вычислить используя производящуюю функцию для полиномов Лежандра $\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta)t^l = \left(1 - 2t\cos\theta + t^2\right)^{-1/2}$ полагая $t = 1$. В итоге для дифференциального сечения получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi^2\beta^2}{4k^2}\frac{1}{(1-\cos\theta)^2} \tag{20}$$

Любопытно отметить, что при интегрировании по углам интеграл расходится логарифмически так же как и сумма по парциальным сечениям.

Список литературы

[ЛЛ] Ландау, Лифшиц, курс теоретической физики, том 3 «Квантовая механика (нерелятивистская теория), 5-е изд. (2002)

[3] При $\beta \le -\frac{1}{4}$ происходит **падение на центр** — гамильтониан становится неограниченным снизу. Физически это бессмысленно — частица может неограниченно «падать» на центр, бесконечно излучая энергию.