Теория рассеяния

November 21, 2015

Постановка задачи Ищется стационарное решение уравнение Шрёдингера (непрерывного спектра) с гамильтонианом $\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\mathbf{r})$ и энергией E. Потенциал $U(\mathbf{r})$ считается локализованным в области пространства вблизи начала координат; в таком случае, нас интересует решение с асимптотическим поведением на $r\to\infty$ вида $\psi(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}+\frac{f(\theta,\varphi)}{r}e^{ik_0r}$, где углы θ и φ - соответственно полярный и азимутальный углы в сферической системе координат, где ось z направлена по $\mathbf{k}_0$. Параметр k_0 связан с энергией E согласно $\frac{\hbar^2k_0^2}{2m}=E$.

Если рассмотреть плотность потока частиц, которая соответствует этому решению, согласно формуле $j=-\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=\frac{\hbar}{m}\left|\psi\right|^2\nabla\phi$ (для функций вида $\psi=|\psi|e^{i\phi}$), мы получим

$$\mathbf{j}_{\text{пад}}(\mathbf{r})=\frac{\hbar}{m}\mathbf{k}_0,\quad \mathbf{j}_{\text{отр}}(\mathbf{r})=\frac{\hbar}{m}|f(\theta,\varphi)|^2\cdot\frac{1}{r^2}\mathbf{k}$$

(где вектор $\mathbf{k}=k_0\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}$ - единичный, направленный по $\mathbf{r}$). Тем самым, такое решение описывает падающую плоскую и рассеянную сферические волны. Если рассмотреть сечение рассеяние, которое определяется согласно $d\sigma=\frac{dN}{j_{\text{пад}}}$ (dN - число частиц, рассеиваемых в единицу времени; соответственно $dN=j_{\text{отр}}dS=j_{\text{отр}}r^2d\Omega$), то мы получим следующее выражение дифференциального сечения рассеяния в телесный угол $d\Omega$: $\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta,\varphi)|^2$. Величина $f(\theta,\varphi)$ называется амлитудой рассеяния. В частности, полное сечение рассеяния (то есть полное число частиц, рассеиваемых в единицу времени потенциалом, поделённое на плотность падающего потока) определяется $\sigma=\int|f(\theta,\varphi)|^2d\Omega=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\cdot|f(\theta,\varphi)|^2$.

В случае сферически симметричного потенциала, в силу аксиальной симметрии полной задачи, зависимость от φ везде выпадает [пар.123 “общая теория рассеяния”]

Функция Грина в задаче рассеяния Чтобы продвинуться дальше, нам пригодится функция Грина стационарного уравнения Шрёдингера. Она определяется как решение уравнения:

$$(E-\hat{H})G(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

Для свободной частицы $\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}$, в задаче имеется трансляционная симметрия и функция $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')\equiv G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Для решения этой задачи, можно воспользоваться преобразованием Фурье; в частности, мы получим:

$$G(\mathbf{r})=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}G(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},\quad (E-\frac{\hbar^2k^2}{2m})G(\mathbf{k})=1$$

$$G(\mathbf{r})=\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}+i\epsilon}=\frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\int_0^{\infty}k^2dk\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\frac{e^{ikr\cos\theta}}{k_0^2-k^2+i\epsilon}=-\frac{im}{2\pi^2\hbar^2}\frac{1}{r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ikr}k}{k_0^2-k^2+i0}dk=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik_0r}}{r}$$

Имеется важное замечание, касающееся обхода полюсов, поскольку они лежат на вещественной оси $k=\pm k_0$. Для того, чтобы выяснить, как их обходить, необходимо поставить граничные условия для уравнения, которое мы решаем. Нас интересует так называемая запаздывающая функция Грина, которая определяется как решение уравнения с асимптотикой на бесконечности в виде расходящейся волны $\propto e^{ikr}$. Это соответствует тому, что полюс $k=k_0$ мы обходим снизу (и интеграл “садится” на вычет в нём); в то время как полюс $k=-k_0$ мы обходим сверху. Это мнемоническое правило обхода можно записать с помощью так называемой ϵ-прескрипции (как показано выше); а именно, если при $\epsilon\to0$ добавить $i\epsilon$ в знаменатель, то полюса сдвинутся в мнимую плоскость согласно $k\approx\pm k_E(1+i\frac{\epsilon}{2k_E^2})$; полюса уже не лежат на вещественной оси, поэтому интеграл хорошо определён и садится только на нужный полюс $k=k_E+i\delta$; дальше можно взять предел $\epsilon\to0$ и получить нужное выражение. Для других граничных условий в общем случае необходимо выбрать другой обход полюсов; мы получим другие функции Грина.

Возвращаясь к исходному уравнению с потенциалом, его можно записать как:

$$(E-\hat{H}_0)\psi(\mathbf{r})=U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\Rightarrow\psi(\mathbf{r})=\int d^3\mathbf{r}'U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')G_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

Согласно этому соотношению, мы делаем следующий вывод. Если мы знаем поведение волновой фунцкии $\psi(\mathbf{r})$ в области, где действует потенциал $U(\mathbf{r}) \neq 0$, то благодаря этой формуле мы можем восстановить поведение функции во всём пространстве.

В частности, мы можем определить и её асимптотику на $r \to \infty$. Действительно, раскладываясь по r'/r под интегралом, мы получаем:

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{r}' U(\mathbf{r}')\frac{e^{ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\psi(\mathbf{r}') \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik_0 r}}{r}\int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'}$$

Сравнивая с тем решением, которое мы ищем, мы можем связать амплитуду $f(\theta,\varphi)$ с поведением волновой функции в области рассеивателя согласно формуле:

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'}$$

[пар. 45 “потенциальная энергия как возмущение”]

Борновское приближение В частности, если потенциал такой слабый, что он практически не возмущает волновую функцию в области рассеивателя, то в эту формулу можно подставить $\psi(\mathbf{r}') \approx e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}'}$ и получить амплитуду рассеяния в борновском приближении (это соответствует просто первому порядку теории возмущений):

$$f(\theta,\varphi) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}U(\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$$

то есть амплитуда выражается попросту через фурье-компоненту потенциала; $\mathbf{q}$ имеет явный физический смысл переданного частице импульса [пар. 126 “формула Борна”].

Пример Рассеяние медленных частиц ($k_0 a \ll 1$) на слабом потенциале $U(r) = U_0\frac{a^n}{r^n+a^n}$ ($\alpha \equiv ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$). В таком случае зависимомстью от q можно пренебречь и получить:

$$f(\theta) \approx -\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}a\int_0^\infty \frac{z^2}{z^n+1}dz$$

Этот интеграл - число $\int_0^\infty \frac{z^2}{z^n+1}dz = \frac{1}{n}B(1-\frac{3}{n},\frac{3}{n}) = \frac{\pi}{n\sin\frac{3\pi}{n}}$. Рассеяние медленных частиц получилось изотропным (это - довольно общее свойство в задачах рассеяния медленных частиц); амплитуда равна $f = -\frac{2\pi}{n\sin\frac{3\pi}{n}}\alpha a$; в частности, сечение равно $\sigma = \frac{16\pi^3}{n^2\sin^2\frac{3\pi}{n}}\alpha^2\cdot a^2 \ll a^2$.

Фазовая теория рассеяния Рассмотрим частный случай сферически симметричного потенциала. Тут имеется базис сферических волн, удовлетворяющих уравнению Шрёдингера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\psi(r) = E\psi(r)$$

В сферических координатах лапласиан записывается как $\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]$. В квадратных скобках стоит оператор квадрата углового момента $\hat{L}^2 = -\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)$, действующий только на углы. Этот оператор связан с операторами углового момента $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) \equiv \mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}$ и удовлетворяет алгебре $\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$; он реализует представление этой алгебры на функциях, определённых на сфере. Поэтому можно использовать всё, что мы знаем про представления этой алгебры; а именно, собственные функции характеризуются целыми числами $l \geq 0$ и $m = -l,\ldots,l$; эти функции называются сферическими гармониками и обозначаются $Y_{lm}(\theta,\varphi)$. В частности, $\hat{L}^2Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ и $\hat{L}_zY_{lm}(\theta,\varphi) = mY_{lm}(\theta,\varphi)$. В сферических координатах оператор $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$, поэтому зависимость от угла φ тривиальна и даётся $Y_{lm}(\theta,\varphi) \propto P_l^m(\theta)e^{im\varphi}$. $P_l^m(\theta)$ называются присоединёнными полиномами Лежандра [пар. 32 “движение в центрально-симметричном поле”; математическое дополнение, пар. c “полиномы Лежандра”].

После разделения переменных $\psi(r) = R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ на радиальную часть получается уравнение:

$$R_l''(r) + \frac{2}{r}R_l'(r) + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r) = 0$$

Подстановкой $R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r}$ это уравнение сводится к УШ в изменённом одномерном потенциале $U'(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r)$, которое нужно решать с граничным условием $\chi(r=0) = 0$. Поправка к потенциалу носит название центробежного потенциала.

Для свободной частицы $U(r) \equiv 0$ можно продвинуться дальше. Для задачи с $l = 0$ центробежный потенциал отсутствует, и решение выписывается тривиально: $\chi_0(r) = 2\sin kr \Rightarrow R_0^{(0)}(r) = 2\frac{\sin kr}{r}$ (константа выбрана для согласованности обозначений с ЛЛ). Для произвольного l подстановкой $R_l(r) = \frac{Q_l(r)}{\sqrt{r}}$ уравнение сводится к уравнению Бесселя с полуцелым индексом; общий вид решения: $R_l^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{l+1/2}(kr) \equiv 2kj_l(kr)$ ($j_l(z)$ называется "сферическими функциями Бесселя"). Асимптотика таких функций на бесконечности $R_l^{(0)}(r) \approx \frac{2}{r}\sin(kr - \frac{l\pi}{2})$, которая совпадает с точным ответом при $l = 0$ [пар. 33 "сферические волны"].

В общем случае при наличии потенциала, решение $R_l(r)$ на бесконечности (где потенциал всё-таки ноль) выражается как через функции Бесселя, так и функции Неймана, у которых асимптотика имеет вид cos вместо sin. Поэтому, раскладывая искомое решение УШ по сферическим стационарным состояниям УШ, мы в общем виде можем записать:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) R_l(r)$$

с асимптотиками общего вида $R_l(r) = \frac{2}{r}\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)$. В случае отсутствия рассеяния, фазовые сдвиги $\delta_l \equiv 0$. Для того, чтобы определить $f(\theta)$, необходимо воспользоваться ещё одним соотношением, которые раскладывает e^{ikz} по базису $R_l^{(0)}$:

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

[пар. 34 "разложение плоской волны"]. Раскладывая все слагаемые на падающие $\frac{1}{r}e^{ikr}$ и $\frac{1}{r}e^{-ikr}$ волны, мы получим:

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

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:

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

Эта формула выражает амплитуду рассеяния через фазовые сдвиги δ_l; задача сводится к их нахождению [пар. 124 "исследование общей формулы"]. 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 согласно

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

Величины σ_l называются парциальными сечениями; они описывают рассеяние частиц с различными орбитальными моментами $l = 0, 1, \ldots$. Их называют каналами рассеяния (говоря о рассеянии с $l = 0$, например, говорят о s-канале рассеяния. В частности, мы выяснили, что медленные частицы как правило рассеиваются именно в s-канале).

Оптическая теорема Имеется очень важное соотношение, которое напрямую связано с унитарностью рассеяния и с сохранением полного числа частиц. Оно позволяет выразить сечение рассеяния через амплитуду рассеяния вперёд:

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

Оптическая теорема даёт ещё один способ вычисления полного сечения рассеяния; иногда правую часть оказывается гораздо проще вычислить [пар. 125 "условие унитарности для рассеяния"].

Пример Рассмотрим рассеяние медленных частиц на твёрдом шаре радиуса a:

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

Рассматривая рассеяние в s-канале, и используя подстановку для радиальной ВФ через $\chi(r)$, мы получаем просто одномерное движение в потенциале $U(r)$. Точное решение записывается как $\chi_0(r) = \sin(k(r-a))$. Сравнивая с "свободным" решением $\chi_0^{(0)}(r) = \sin(kr)$, мы получаем выражение для фазового сдвига $\delta_0 = -ka$; соответственно, сечение рассеяния в s-канале равно $\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \approx 4\pi a^2$, что в 4 раза больше сечения рассеяния классических частиц $\sigma = \pi a^2$. Это связано с дифракционными эффектами.

Большие энергии (эйконал, квазиклассика) Очень быстрые частицы $ka \gg 1$ пролетают, практически не чувствуя потенциала; рассеиваются они на малые углы. В таком случае удобный анзац для волновой функции выглядит как $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}F(\mathbf{r})$ с медленной огибающей $f(\mathbf{r})$. Подставляя это в УШ, мы получаем:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) = -k_0^2\psi(r) + 2i(\mathbf{k}_0\boldsymbol{\nabla})F(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}\Delta F(\mathbf{r})$$

Выбрасывая "медленную" огибающую $\Delta F(\mathbf{r}) \ll k_0\nabla F(\mathbf{r})$, и направляя $\mathbf{k}_0$ по оси z, мы получаем:

$$2ik_0\partial_z F(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{2m}{\hbar^2}U(\boldsymbol{\rho}, z)F(\boldsymbol{\rho}, z)$$

(тут $\boldsymbol{\rho}$ - радиус-вектор в поперечном сечении; имеющий смысл прицельного параметра для классических частиц). Решение записывается как:

$$F(\boldsymbol{\rho}, z) = e^{2i\delta(\boldsymbol{\rho}, z)}, \quad \delta(\boldsymbol{\rho}, z) = -\frac{1}{2\hbar v}\int_{-\infty}^{z} U(\boldsymbol{\rho}, z)dz$$

На больших расстояниях $r \to \infty$ эта асимптотика уже не работает; однако, она прекрасно работает в области рассеивателя. Поэтому мы можем воспользоваться выражением, выведенным ранее, и получить выражение для амплитуды рассеяния быстрых частиц:

$$f(\theta) \approx \frac{k}{2\pi i}\int (e^{2i\delta(\boldsymbol{\rho}, z)} - 1)e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}}d^2\boldsymbol{\rho}$$

где $\mathbf{q}$ как обычно - переданный импульс; он считается малым $q_z \approx 0$. Величина $\delta(\boldsymbol{\rho})$ оказывается приближенно равна фазам рассеяния с $\delta_{l=\rho k} = \delta(\rho)$ [пар. 131 "рассеяние при больших энергиях"]