Семинар 14. Теория рассеяния и функция Грина

Постановка задачи рассеяния

Ранее (на семинаре про непрерывный спектр) изучалась задача одномерного рассеяния. В ней мы искали решения уравнения Шрёдингера в некотором локализованном потенциале $V(x)$, имеющие следующие асимптотики вдали от рассеивающего центра (при $x \to \pm\infty$), включающие в себя падающую, отражённую, и прошедшую волны:

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

Такая постановка 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 (см. рис. (1)):

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

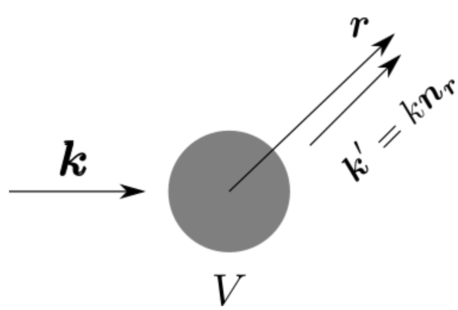

Рис. 1: Задача рассеяния в многомерном пространстве.

Направление $\boldsymbol{n}$ соответствует направлению падающей волны $e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$, а $\boldsymbol{n}'$ — направлению на наблюдателя в точке $\boldsymbol{r}$ (направление рассеянной волны); введём также $\boldsymbol{k}' = k\boldsymbol{n}'$. Данный вид волновой функции представляет собой первые два члена асимптотического разложения по $1/r$, поэтому, вообще говоря дальше будут иметься члены $O(1/r^2)$, 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 $[f] = \mathrm{cm}$, и зависит в случае общего положения от направления обоих векторов[1]; однако в случае сферической симметрии потенциала амплитуда рассеяния может зависеть только от *угла рассеяния* — угла θ между векторами $\boldsymbol{n}$ и $\boldsymbol{n}'$:

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

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

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. Тогда 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:

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

Оно имеет размерность площади $[\sigma] = \text{cm}^2$ и может быть интерпретировано, как площадь поверхности, перпендикулярной потока, которая собирала бы на себя (в классическом случае) количество частиц, равное количеству частиц, улетевших в сектор телесных углов $d\Omega$.

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

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

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 относительно невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0 = p^2/2m$. 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 $\hat{H}_0|\boldsymbol{k}\rangle = E|\boldsymbol{k}\rangle$, $E = k^2/2m$):

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

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 только что столкнулись, носит название *резольвенты оператора* $\hat{H}$, и обозначается следующим образом:

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

Несложно записать решение этого уравнения в общем виде. Пусть $\{|n\rangle, E_n\}$ образуют спектр гамильтониана. В этом базисе оператор $E-\hat{H}$ легко обращается:

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

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. В предельном переходе к непрерывному спектру полюса сливаются в разрез; это будет продемонстрировано ниже на примере функции Грина свободной частицы.

Представление резольвенты в координатном представлении называется *функцией Грина*[5] $G_E(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \langle\boldsymbol{r}|\hat{G}_E|\boldsymbol{r}'\rangle$. Она удовлетворяет следующему уравнению:

---

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

[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] Мы будем использовать эти термины как взаимозаменяемые

$$(E-\hat{H})G_E(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \tag{10}$$

при этом оператор $\hat{H} = -\nabla^2_{\boldsymbol{r}}/2m + V(\boldsymbol{r})$ действует на первый аргумент ($\boldsymbol{r}$) функции Грина. Несложно видеть, что она определена неоднозначно: если к ней добавить произвольное решение однородного уравнения (например, плоскую волну), то она по-прежнему будет удовлетворять уравнению (8) (это непосредственно связано с аналитической структурой функции Грина — на энергиях, где такое решение однородного уравнения существует, она имеет либо полюса, либо разрез).

Функция Грина свободной частицы

Определим функцию Грина для свободной частицы $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$; 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):

$$G_E^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{E-\frac{k^2}{2m}} \tag{11}$$

Тут мы немедленно сталкиваемся с проблемой: при $E>0$ этот интеграл не определён, потому что в области интегрирования имеется неинтегрируемая особенность при $E = k^2/2m$. 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 $G(t,\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \int (dE)\, G_E(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{-iEt}$ 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:

$$\begin{aligned} G_E^{(0,R)}(\boldsymbol{r}) &= \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{E+i0-\frac{k^2}{2m}} = \frac{m}{2\pi^2}\int_0^\infty k^2dk\int_0^\pi \sin\theta d\theta\frac{e^{ikr\cos\theta}}{k_E^2-k^2+i0} = \\ &= \frac{m}{2\pi^2 ir}\int_0^\infty kdk\frac{e^{ikr}-e^{-ikr}}{k_E^2-k^2+i0} = \frac{m}{2\pi^2 ir}\int_{-\infty}^\infty \frac{k}{k_E^2-k^2+i0}e^{ikr}dk \end{aligned} \tag{12}$$

Полученное выражение имеет полюса при $k=\pm(k_E+i0)$. Так как модуль радиус-вектора $r>0$, 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) получим:

$$\boxed{G_E^{(0,R)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik_Er}}{r},\quad k_E = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}} \tag{13}$$

Во-первых, отметим, что у функции Грина действительно имеется разрез в комплексности плоскости E (из-за $\sqrt{E}$). Путём аналитического продолжения (или просто комплексного сопряжения) легко получить выражение для запаздывающей функции Грина (опережающей):

$$\boxed{G_E^{(0,A)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{-ik_Er}}{r}} \tag{14}$$

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

Теория возмущений и T-матрица

Для функции Грина удобно 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:

$$\boxed{\hat{G}_E = (E-\hat{H}_0-\hat{V})^{-1} = \hat{G}_E^{(0)} + \hat{G}_E^{(0)}\hat{V}\hat{G}_E^{(0)} + \hat{G}_E^{(0)}\hat{V}\hat{G}_E^{(0)}\hat{V}\hat{G}_E^{(0)} + \ldots.} \tag{15}$$

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

В задаче рассеяния, однако, требуется найти не функцию Грина, а рассеявшуюся компоненту волновой функции $|\chi\rangle$. Как мы видели раньше, она равна

$$|\chi\rangle = (E-\hat{H})^{-1}\hat{V}\,|\boldsymbol{k}\rangle = \left[\hat{G}_E^{R(0)}\hat{V} + \hat{G}_E^{R(0)}\hat{V}\hat{G}_E^{R(0)}\hat{V} + \ldots\right]|\boldsymbol{k}\rangle = \hat{G}_E^{R(0)}\left[\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_E^{R(0)}\hat{V} + \ldots\right]|\boldsymbol{k}\rangle = \hat{G}_E^{R(0)}\hat{T}_E\,|\boldsymbol{k}\rangle\,, \tag{16}$$

где был введён важный объект, носящий название $\hat{T}$-*матрицы*:

$$\boxed{\hat{T}_E = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_E^{R(0)}\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_E^{R(0)}\hat{V}\hat{G}_E^{R(0)}\hat{V} + \dots = (1-\hat{V}\hat{G}_E^{R(0)})^{-1}\hat{V}.} \tag{17}$$

$\hat{T}$-матрицу тоже удобно вычислять по теории возмущений, и, как мы покажем ниже, через нее легко выражается амплитуда рассеяния:

$$\boxed{f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}') = -\frac{m}{2\pi}\left\langle\boldsymbol{k}'\right|\hat{T}_E\,|\boldsymbol{k}\rangle} \tag{18}$$

Напомним, что здесь $|\boldsymbol{k}| = \left|\boldsymbol{k}'\right| = \sqrt{2mE}$ (находятся на «массовой поверхности»), хотя в принципе T-матрица определена для произвольных значений импульса.

Связь T-матрицы и амплитуды рассеяния

Воспользуемся уравнением (16) и запишем $|\chi\rangle$ в координатном представлении:

$$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\,\hat{G}_E^{(0)}\hat{T}_E\,|\boldsymbol{k}\rangle = \int d\boldsymbol{r}'(d\boldsymbol{k}')\,\langle\boldsymbol{r}|\,\hat{G}_E^{(0)}\,|\boldsymbol{r}'\rangle\,\langle\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{k}'\rangle\,\left\langle\boldsymbol{k}'\right|\hat{T}_E\,|\boldsymbol{k}\rangle =$$

$$= \int d\boldsymbol{r}'(d\boldsymbol{k})G_E^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}'}T_E(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = -\frac{m}{2\pi}\int d\boldsymbol{r}'(d\boldsymbol{k}')\frac{e^{ik_E|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}e^{i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}'}T_E(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'), \tag{19}$$

где была введена T-матрица в импульсном представлении $T_E(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \left\langle\boldsymbol{k}'\right|\hat{T}_E\,|\boldsymbol{k}\rangle$. Заметим также, что $k_E = k$. Так как нас интересует асимптотика $\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ на больших $\boldsymbol{r}$, то разложим $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \approx r - \boldsymbol{n_r}\boldsymbol{r}'$. В экспоненте сохраним два члена, а в предэкспоненте один:

$$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{m}{2\pi}\int d\boldsymbol{r}'(d\boldsymbol{k}')\frac{e^{ikr-ik\boldsymbol{n_r}\boldsymbol{r}'}}{r}e^{i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}'}T_E(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'). \tag{20}$$

Интеграл по $\boldsymbol{r}'$ даёт трёхмерную дельта-функцию, которая фиксирует значение $\boldsymbol{k}'$ равным $k\boldsymbol{n_r}$:

$$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{m}{2\pi}\frac{e^{ikr}}{r}T_E(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'). \tag{21}$$

Отсюда получаем (18), в котором $\boldsymbol{k}' = k\boldsymbol{n_r}$ имеет смысл, введённый в начале семинара.

Борновское приближение

Ведущее приближение для T-матрицы есть $\hat{T}_E \approx \hat{V}$. Это приближение носит название *Борновского*. В нем амплитуда рассеяния выражается очень просто: как Фурье-образ потенциала, взятый на волновом векторе $\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ (который соответствует переданному от потенциала частице импульсу при акте рассеяния):

$$\boxed{f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}') = -\frac{m}{2\pi}\tilde{V}_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}} \tag{22}$$

Заметим что $\left|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'\right| = 2k\sin(\theta/2)$, тогда для сферически симметричного потенциала

$$\boxed{f(\theta) = -\frac{m}{2\pi}\tilde{V}\left(2k\sin\frac{\theta}{2}\right)}, \tag{23}$$

Применимость Пусть потенциал имеет характерную глубину $\sim V_0$ и характерный линейный размер $\sim a$. Обсудим вопрос применимости Борновского приближения. Необходимо, чтобы поправка была мала $|\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})| \ll 1$. Это условие заведомо выполнено вдали от рассеивателя, т.к. там $\chi(r) \propto 1/r$. Существенно, что это условие должно быть также выполнено и при $r \lesssim a$. В Борновском приближении поправку (19) можно переписать в координатном представлении в следующем виде:

$$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = -\frac{m}{2\pi} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \int d\boldsymbol{r}' \frac{e^{ikr' + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'}}{r'} V(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}') \tag{24}$$

Для оценки этого интеграла, принципиально важно различать случай «медленных» частиц $ka \lesssim 1$ и «быстрых» частиц $ka \gg 1$. Для медленных частиц, осцилляции в экспоненте слабые, и в рамках оценки мы можем заменить их на 1; интеграл оценивается как:

$$|\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})| \lesssim mV_0 a^2, \quad (ka \lesssim 1) \tag{25}$$

В случае $ka \gg 1$ сильно осциллирующая экспонента $e^{ikr' + i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}'} = e^{ikr'(1+\cos\theta)}$ «обрежет» этот интеграл. Для его оценки вычислим объем области, ограниченной с одной стороны областью локализации потенциала, а с другой стороны, кривой, на которой фаза в экспоненте поменяется на величину порядка 1: $kr'(1+\cos\theta) \sim kr' \sin^2(\theta/2) \sim 1$. Поправка максимальна внутри ямы $r, r' \lesssim a$, и в этом случае можно видеть, что искомая область хорошо приближается частью конуса с углом раствора $\theta^* \sim 1/\sqrt{ka}$ (см. Рис. (2)), а вклад приходит с небольших углов $|\pi - \theta| \lesssim \theta^*$. Благодаря параметрической малости этой области, оценка интеграла для $\chi_{\boldsymbol{k}}$ оказывается более строгой: оценивая объем конуса как $(\theta^* a)^2 \cdot a \sim a^3/ka$ (в ka раз меньше, чем вся область потенциала) , имеем

$$|\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})| \lesssim \frac{mV_0 a^2}{ka}, \quad (ka \gg 1) \tag{26}$$

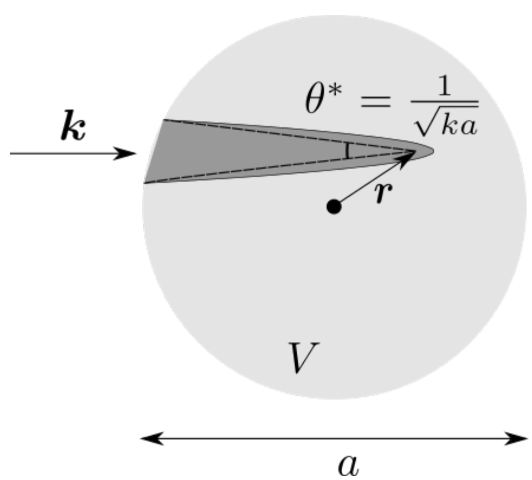

Рис. 2: Рассеяние быстрых частиц на локализованном потенциале; обозначена область, от которой приходит наибольший вклад в $\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$

Из выражений (25) и (26) следует, что для выполнения условия $|\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})| \ll 1$ достаточно одного из двух условий: либо $mV_0 a^2 \ll 1$, что совпадает с условием на мелкую яму, либо $mV_0 a^2/(ka) \ll 1$, что является условием на то, что частицы двигаются достаточно быстро. Последнее также интуитивно понятно — быстро движущиеся частицы проводят мало времени в поле потенциала и поэтому рассеиваются слабо.

$$\begin{gathered} mV_0 a^2 \ll 1 \quad \text{(мелкая яма)} \\ \text{либо} \\ \frac{mV_0 a^2}{ka} \ll 1 \quad \text{(быстрые частицы)} \end{gathered} \tag{27}$$

Рассеяние быстрых и медленных частиц Обсудим ещё некие общие свойства рассеяния, которые выполняются и за рамками Борновского приближения, но на примере которого их можно проследить.

- Если частицы медленные (то есть $ka \ll 1$), то $V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'} \approx V_0$; зависимость от θ пропадает, и частицы рассеиваются изотропно (или, как говорят, рассеяние происходит в s-канале — смысл этих слов станет понятен на следующем семинаре).

- Для случая быстрых частиц $ka \gg 1$, поскольку масштаб Фурье-образа потенциала $\tilde{V}$ равен $1/a$, то характерные углы рассеяния оказываются малыми $\theta \lesssim 1/ka$. Таким образом, быстрые частицы рассеиваются на малые углы (что интуитивно понятно из тех же 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. Выше рассматривался трёхмерный случай, а здесь мы рассмотрим альтернативный вывод, который легко проделать в пространстве любой размерности. Воспользуемся золотым правилом Ферми (семинар про нестационарную теорию возмущений, переходы в непрерывном спектре). В качестве исходного состояния мы возьмём падающую волну $|i\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle$, а в качестве конечного — рассеянную волну $|f\rangle = |\boldsymbol{k}'\rangle$. Матричный элемент возмущения как раз равен $V_{fi} \equiv V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}$; и тогда золотое правило Ферми приводит к следующему выражению для количества переходов в единицу времени:

$$dN_{\text{расс}} \equiv d\omega_{i\to f} = 2\pi |V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}|^2 \delta\left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k'^2}{2m}\right)\frac{d^d\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^d} = \frac{mk'^{d-2}}{(2\pi)^{d-1}}|V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}|^2\delta\left(k-k'\right)dk'd\Omega \tag{28}$$

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

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2 k'^{d-3}}{(2\pi)^{d-1}}|V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}|^2} \tag{29}$$

В частности, при $d=3$, несложно видеть, $d\sigma/d\Omega = m^2|V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}|^2/4\pi^2 \equiv |f(\theta)|^2$, где $f(\theta)$ даётся формулой Борна (23).

Недостатком этого способа является то, что он позволяет найти только сечение рассеяния, но не амплитуду, а в фазе амплитуды рассеяния (как мы видели в семинаре про непрерывный спектр) содержится содержательная информация.

Оптическая теорема и соотношение унитарности

Свойство унитарности квантовомеханической эволюции приводит к определенным соотношениям для амплитуды рассеяния, самое известное из которых носит название **оптической теоремы**. В трёхмерном случае она имеет вид:

$$\boxed{\mathrm{Im} f\left(\theta = 0\right) = \frac{k}{4\pi}\sigma.} \tag{30}$$

Её можно приблизительно понять как соотношение между полным количеством рассеянных частиц и убылью количества частиц, не изменивших направления. Часто оптическая теорема представляет более простой способ вычислить полное сечение рассеяния — поскольку для него не требуется вычисления всей амплитуды рассеяния $f(\theta)$. Отметим, что в рамках формулы Борна, $f(\theta=0) = -\frac{m}{2\pi}\int d\boldsymbol{r} V(\boldsymbol{r})$ — чисто вещественная величина. Мнимость появляется лишь во втором порядке теории возмущений, в то время как для вычисления правой части достаточно амплитуды рассеяния в первом порядке; тем самым, оптическая теорема для формулы Борна не даёт никаких преимуществ.

Для вывода соотношения унитарности рассмотрим объект $\hat{T}_E - \hat{T}_E^\dagger$ (по аналогии с $\mathrm{Im} f = \left(f - f^\dagger\right)/2i$). Подставляя выражение (17), получим:

$$\begin{aligned}\hat{T}_E - \hat{T}_E^\dagger = (1-\hat{V}\hat{G}_E^{R(0)})^{-1}\hat{V} - \hat{V}(1-\hat{G}_E^{A(0)}\hat{V})^{-1} = (1-\hat{V}\hat{G}_E^{R(0)})^{-1}\left[\hat{V}(1-\hat{G}_E^{A(0)}\hat{V}) - (1-\hat{V}\hat{G}_E^{R(0)})\hat{V}\right](1-\hat{G}_E^{A(0)}\hat{V})^{-1} = \\ = (1-\hat{V}\hat{G}_E^{R(0)})^{-1}\hat{V}(\hat{G}^{R(0)} - \hat{G}^{A(0)})\hat{V}(1-\hat{G}_E^{A(0)}\hat{V})^{-1} \equiv \hat{T}_E(\hat{G}_E^{R(0)} - \hat{G}_E^{A(0)})\hat{T}^\dagger\end{aligned} \tag{31}$$

Применим к функции Грина формулу Сохоцкого:

$$\hat{G}^{R(A)} = \frac{1}{E - \hat{H} \pm i0} = \mathcal{P}\frac{1}{E-\hat{H}} \mp i\pi\delta\left(E - \hat{H}\right), \tag{32}$$

которое нужно понимать, как определённое в базисе собственных функций гамильтониана, например, $\delta\left(E - \hat{H}\right) := \sum_n \delta(E-E_n)\left|n\right\rangle\left\langle n\right|$[7]. Тогда

$$\boxed{\hat{T}_E - \hat{T}_E^\dagger = -2\pi i \hat{T}_E \delta(E - \hat{H}_0)\hat{T}_E^\dagger.} \tag{33}$$

Переписывая это соотношение на языке амплитуды рассеяния с помощью (18), получим *соотношение унитарности*:

[7] Это общий правильный подход к определению функций от матриц и операторов. Определение через разложение в ряд плохо тем, что возникает множество проблем с областью сходимости.

$$\boxed{f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}') - f^*(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n}) = i\frac{k}{2\pi}\int d\boldsymbol{n}'' f(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n}'')f^*(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'').} \tag{34}$$

Если взять частный случай $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}'$, то получим оптическую теорему (30).

Пример: борновское прибижение

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:

$$V_{\boldsymbol{q}} = V_0 \int d\boldsymbol{r} e^{-r^2/a^2 + i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}} = V_0 \int d\boldsymbol{r} e^{-\frac{1}{a^2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}a^2/2)^2 - q^2a^2/4} = \pi^{3/2} V_0 a^3 e^{-q^2a^2/4}. \tag{35}$$

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

$$f(\theta) = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} V_0 m a^3 e^{-q^2a^2/4} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} V_0 m a^3 e^{-k^2a^2(1-\cos\theta)/2}. \tag{36}$$

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

$$\sigma = \frac{\pi^2}{4}\frac{m^2a^6V_0^2}{k^2}\int_0^{4k^2} d(q^2) e^{-q^2a^2/4} = \frac{\pi^2 m^2 a^4 V_0^2}{k^2}(1 - e^{-k^2a^2}). \tag{37}$$

Для медленных частиц $ka \ll 1$ это даёт $\sigma_{\text{slow}} \approx \left(\frac{\pi V_0}{1/ma^2}\right)^2 a^2 \ll a^2$, а для быстрых — $\sigma_{\text{fast}} \approx \left(\frac{\pi V_0}{1/ma^2}\right)^2 \frac{1}{k^2} \ll \sigma_{\text{slow}}$. 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. В обоих случаях рассеивание оказывается слабым (а именно, сечение рассеяния гораздо меньше геометрических размеров рассеивателя a^2).