УДК 539.17

О РАССЕЯНИИ НА ПРОСТЕЙШЕМ СИНГУЛЯРНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

В. И. Беляк

Показано, что неоднозначность выбора решения, возникающая в квантовой задаче рассеяния на простейшем сингулярном потенциале, обратно пропорциональном квадрату расстояния от центра потенциала, может быть устранена с помощью обрезания потенциала с последующим бесконечнократным усреднением решения по радиусу обрезания.

Будем рассматривать нерелятивистское рассеяние частиц на простейшем сингулярном потенциале притяжения

$$U(r) = -a/r^2,\ a > 0 \tag{1}$$

(для потенциала отталкивания трудностей не возникает).

Даже классическое рассеяние на таком потенциале происходит не тривиальным образом. А именно, частицы с угловыми моментами $M < M_0 = \sqrt{2am}$ падают в центр поля, приближаясь к нему по бесконечной спирали.

При квантовом рассмотрении указанная особенность классического движения частиц с моментами $M < M_0$ перерастает в принципиальную трудность – неоднозначность выбора решения волнового уравнения, связанная с невозможностью использовать стандартные краевые условия при $r \to 0$ [1 – 3]. Эта трудность возникает при $M_0 > \hbar/2$.

В настоящей работе решение квантовой задачи рассеяния на потенциале (1) определяется однозначно с помощью обрезания потенциала с последующим бесконечнократным усреднением решения по радиусу обрезания на некотором малом интервале, включающем центр поля. Полученное таким образом решение описывает поглощение парциальных волн (падение частиц в центр) с $M = \hbar(l + 1/2) < M_0$. В классическом пределе, когда $(M_0 - M)/\hbar \to \infty$, это поглощение становится полным, что совпадает с классическим результатом.

1. Рассеяние частиц на потенциале (1) будем описывать уравнением Шредингера, которое запишем в виде

$$[\nabla^2 + k^2(1 - u(r))]\Psi(\mathbf{r}) = 0,\ u(r) = U(r)/E = -\gamma^2/k^2r^2,\ \gamma = \sqrt{2am}/\hbar, \tag{2}$$

где k, E, m – волновое число, энергия и масса рассеиваемых частиц. Полагаем $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} R^l(r)P_l(\cos\theta)$. При этом радиальная волновая функция $R^l(r)$ для l-ой парциальной волны удовлетворяет уравнению

$$\{\nabla_r^2 + k^2[1 - (\lambda_u^2 - 1/4)/k^2r^2]\}R^l(r) = 0,\ \lambda_u = \sqrt{\lambda^2 - \gamma^2},\ \lambda = l + 1/2. \tag{3}$$

А. В случае $\lambda \geq \gamma$ ($M \geq M_0$), когда $\lambda_u \geq 0$, рассеяние описывает решение уравнения (3), которое при $r \to 0$ конечно ($\lambda_u \geq 1/2$) или расходится слабее, чем второе линейно независимое решение ($0 \leq \lambda_u < 1/2$). Это решение, которое отметим знаком + (с точностью до постоянного множителя) имеет вид (индекс l далее, как правило, будем опускать)

$$R_+(r) \equiv R_+^l(r) = R(kr, \lambda_u) \equiv \sqrt{\pi/2kr}\,J_{\lambda_u}(kr) \to b(\lambda_u)(kr)^{-1/2+\lambda_u} \text{ при } r \to 0,$$

$$b(\lambda_u) = \sqrt{\pi/2}\,2^{-\lambda_u}/\Gamma(1 + \lambda_u),\ R_+(r) \to (1/kr)\sin(\Phi_0 + \sigma_+) \text{ при } r \to \infty, \tag{4}$$

$$\Phi_0 = kr - \pi l/2,\ \sigma_+ = (\pi/2)(\lambda - \lambda_u),\ S_+ = \exp(2i\sigma_+) \equiv S(\lambda, \lambda_u),$$

где σ_+ – сдвиги фаз рассеяния, S_+ – матрица рассеяния.

Для дальнейшего потребуется также второе линейно независимое решение уравнения (3), которое при $\lambda_u \neq n$ ($n = 0, 1, 2...$) можно взять в виде, отличающемся от (4) только заменой λ_u на $-\lambda_u$

$$R_-(r) = R(kr, -\lambda_u) = \sqrt{\pi/2kr}\,J_{-\lambda_u}(kr) \to b(-\lambda_u)(kr)^{-1/2-\lambda_u} \text{ при } r \to 0,$$

$$\sigma_- = (\pi/2)(\lambda + \lambda_u),\ S_- = \exp(2i\sigma_-) = S(\lambda, -\lambda_u), \tag{5}$$

или при всех $\lambda_u \geq 0$ – в виде

$$\tilde{R}_-(r) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}N_{\lambda_u}(kr) \to \frac{b(-\lambda_u)}{\sin(-\pi\lambda_u)}(kr)^{-1/2-\lambda_u} \text{ при } r \to 0, \lambda_u > 0,$$

$$\tilde{\sigma}_- = (\pi/2)(\lambda - \lambda_u - 1),\ \tilde{S}_- = \exp(2i\tilde{\sigma}_-). \tag{6}$$

Здесь σ_-, $\tilde{\sigma}_-$ – фазовые сдвиги соответственно решений (5), (6).

Б. В случае $\lambda < \gamma$ ($M < M_0$), когда $\lambda_u = \pm i\bar{\lambda}_u$, $\bar{\lambda}_u = \sqrt{\gamma^2 - \lambda^2} > 0$ (этот случай возможен при $\gamma > 1/2$, т.е. $a > \hbar^2/8m$) оба линейно независимых решения уравнения (3) ведут себя однотипно (одинаково сингулярно) при $r \to 0$, и не существует явного критерия, позволяющего выбрать одно из решений для описания рассеяния. Выпишем эти решения

$$R_\pm(r) = R(kr, \mp i\bar{\lambda}_u) = \sqrt{\pi/2kr}\,J_{\mp i\bar{\lambda}_u}(kr) \to b(\mp i\bar{\lambda}_u)(kr)^{-1/2\mp i\bar{\lambda}_u} \text{ при } r \to 0,$$

$$R_\pm(r) \to (1/kr)\sin(\Phi_0 + \sigma_\pm) \text{ при } r \to \infty,\ \sigma_\pm = (\pi/2)(\lambda \pm i\bar{\lambda}_u), \tag{7}$$

$$S_\pm = \exp(2i\sigma_\pm) = S(\lambda, \mp i\bar{\lambda}_u).$$

(Отметим, что $\sigma_\pm$, $S_\pm$ в случае Б имеют вид, отличный от вида в случае А.) Решения $R_\pm(r)$ описывают соответственно поглощение и испускание частиц. Для общего решения $R(r) = C_+R_+(r) + C_-R_-(r)$ с произвольными коэффициентами $C_\pm$ матрица рассеяния S (см. ниже (10)) может принимать любые значения, соответствующие как полному поглощению, так и бесконечно большому испусканию.

2. С целью однозначного определения решения задачи рассеяния для всех λ (и, прежде всего, для $\lambda < \gamma$) рассмотрим рассеяние на исходном потенциале (1), (2), обрезанном при достаточно малом радиусе r_0:

$$u(r)_{r_0} = u(r_0) \text{ при } r \le r_0,\ u(r)_{r_0} = u(r) \text{ при } r \ge r_0. \tag{8}$$

Задача рассеяния на потенциале (8) решается однозначно и описывается парциальными решениями $R(r)_{r_0}$, имеющими при $r \ge r_0$ вид

$$R(r)_{r_0} = C_+R_+(r) + C_-R_-(r) \to C(1/kr)\sin(\Phi_0 + \sigma) \text{ при } r \to \infty, \tag{9}$$

$$S = e^{2i\sigma} = \frac{e^{i\sigma_+} + \alpha e^{i\sigma_-}}{e^{-i\sigma_+} + \alpha e^{-i\sigma_-}},\ \alpha = \frac{C_-}{C_+}. \tag{10}$$

Здесь величины $\alpha \equiv \alpha(r_0)$ находятся из сшивания решений при $r = r_0$. При сшивании ограничиваемся учетом наинизших степеней r_0, что всегда возможно при достаточной малости r_0 и является критерием этой малости.

Отметим, что коэффициенты $C_\pm \equiv C_\pm(r_0)$ в (9) с помощью известных в задаче рассеяния значений C^l можно определить и по отдельности

$$C_\pm = (2l+1)i^l\exp(i\sigma_\pm)[S - S_\mp]/[S_\pm - S_\mp].$$

Отсюда видно, что при всех $r \geq r_0$ матрица рассеяния $S \equiv S(r_0)$ входит в волновую функцию (9), описывающую рассеяние, линейно, и только через нее эта волновая функция зависит от r_0.

Остановимся далее (вплоть до п. 5) на наиболее важном случае Б ($\lambda < \gamma$). В этом случае

$$\alpha = \frac{\Gamma(i\bar{\lambda}_u)}{\Gamma(-i\bar{\lambda}_u)} \frac{\chi + i\bar{\lambda}_u}{\chi - i\bar{\lambda}_u} \left(\frac{kr_0}{2}\right)^{-2i\bar{\lambda}_u} \equiv \alpha(r_0) \equiv \alpha_0 r_0^{-2i\bar{\lambda}_u},$$

$$\chi = \gamma J'_\lambda(\gamma)/J_\lambda(\gamma) = \mathrm{Re}\chi, \ |\alpha(r_0)| = |\alpha_0| = 1. \tag{11}$$

Соотношения (10), (11), (7) полностью определяют матрицу рассеяния S. Зависимость матрицы рассеяния S от радиуса обрезания r_0, через $\alpha(r_0)$, – очень сильная; поскольку $\alpha(r_0)$ при $r_0 \to 0$ осциллирует (без затухания), принимая, в частности, бесконечное число раз значения ± 1. Соответственно осциллирует и матрица рассеяния S, принимая при $\alpha = \pm 1$ значения $\pm e^{i\pi\lambda}$.

В пренебрежении величинами порядка $e^{-\pi\bar{\lambda}_u}$ ($\bar{\lambda}_u \to \infty$ соответствует классическому пределу (см. ниже)) имеем: $S(r_0) = e^{i\pi\lambda}\alpha(r_0)$ и $S(r_0)$ осциллирует синхронно с $\alpha(r_0)$ при изменении r_0.

3. С целью уменьшения зависимости от параметра обрезания усредним матрицу рассеяния S по радиусу обрезания r_0, причем на столь малом отрезке $(0, r_1)$, что выражение (11) для α остается справедливым. Усреднение удобно проводить, исходя из записи S в виде

$$S = e^{i\pi\lambda}[e^{-\pi\bar{\lambda}_u} + 2\mathrm{sh}\pi\bar{\lambda}_u s(r_0)] \equiv S(r_0), \ s(r_0) = z(r_0)/(1 + z(r_0)),$$

$$z(r_0) = \alpha(r_0)e^{-\pi\bar{\lambda}_u} \equiv a_0 r_0^{-2i\bar{\lambda}_u}, \ a_0 = \alpha_0 e^{-\pi\bar{\lambda}_u}, \ |z(r_0)| = |a_0| = e^{-\pi\bar{\lambda}_u} < 1. \tag{12}$$

В результате усреднения получим

$$\overline{S(r_0)_{r_1}}^{1} \equiv \frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} S(r_0)dr_0 = e^{i\pi\lambda}[e^{-\pi\bar{\lambda}_u} + 2\mathrm{sh}\pi\bar{\lambda}_u \overline{s(r_0)_{r_1}}^{1}],$$

$$\overline{s(r_0)_{r_1}}^{1} = \sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1} z^m(r_1)/(1 - 2im\bar{\lambda}_u). \tag{13}$$

Отсюда, в частности, при $\pi\bar{\lambda}_u >> 1$ в пренебрежении величинами порядка $\bar{\lambda}_u e^{-\pi\bar{\lambda}_u}$ имеем $\overline{S(r_0)_{r_1}}^{1} = e^{i\pi\lambda}\alpha(r_1)/(1 - 2i\bar{\lambda}_u)$. Усредненная матрица рассеяния $\overline{S(r_0)_{r_1}}^{1}$ (13) зависит вместо радиуса обрезания r_0 от конца интервала усреднения r_1, причем достаточно сильно. И только в классическом пределе, когда при $\hbar \to 0$ моменты $M = \hbar\lambda$

и $M_0 = \hbar\gamma = \sqrt{2am}$ остаются конечными и $\bar{\lambda}_u = \sqrt{(M_0^2 - M^2)}/\hbar \to \infty$, зависимость $\overline{S(r_0)_{r_1}}^{1}$ от r_1 исчезает и получается результат, соответствующий классическому: $\overline{S(r_0)_{r_1}}^{1} = 0$ при $M < M_0$ ($\lambda < \gamma$).

Отметим, что усреднение матрицы рассеяния эквивалентно усреднению волновой функции при любом $r \geq r_1$ (в частности, при $r \to \infty$), поскольку матрица рассеяния линейно входит в эту волновую функцию, и только через нее волновая функция зависит от радиуса обрезания.

4. С целью однозначного и не зависящего от параметра обрезания определения решения задачи рассеяния произведем бесконечнократное усреднение по радиусу обрезания r_0 на достаточно малом отрезке $(0, \bar{r})$ парциальных волновых функций для обрезанного потенциала, с $\lambda < \gamma$ при $r \geq \bar{r}$. Это усреднение сводится к соответствующему усреднению матрицы рассеяния $S(r_0)$.

Под бесконечнократным усреднением функции $f(r_0)$ по r_0 на отрезке $(0, \bar{r})$ понимается: усреднение $f(r_0)$ на $(0, r_1)$, повторное усреднение полученного результата по r_1 на $(0, r_2)$ (r_1 и $r_2 \leq \bar{r}$), n-кратное повторение такой операции и переход к пределу при $n \to \infty$; т.е. выполнение следующих операций:

$$\overline{f(r_0)_{r_1}}^{1} = \frac{1}{r_1}\int\limits_0^{r_1} f(r_0)dr_0, \ \overline{f(r_0)_{r_2}}^{2} = \frac{1}{r_2}\int\limits_0^{r_2} \overline{f(r_0)_{r_1}}^{1} dr_1, \ldots$$

$$\overline{f(r_0)_{r_n}}^{n} = \frac{1}{r_n}\int\limits_0^{r_n} \overline{f(r_0)_{r_{n-1}}}^{n-1} dr_{n-1} \ (r_n \leq \bar{r}), \ \overline{f(r_0)}^{\infty} = \lim_{n\to\infty} \overline{f(r_0)_{r_n}}^{n}. \tag{14}$$

Полученная в результате такого усреднения (14) величина $\overline{f(r_0)}^{\infty}$ представляет интерес, если она определяется однозначно (не зависит от r_n).

Перейдем к бесконечнократному усреднению матрицы рассеяния $S(r_0)$. Исходя из (12), получаем

$$\overline{S(r_0)_{r_n}}^{n} = e^{i\pi\lambda}[e^{-\pi\bar{\lambda}_u} + 2\mathrm{sh}\pi\bar{\lambda}_u \overline{s(r_0)_{r_n}}^{n}], \ \overline{s(r_0)_{r_n}}^{n} = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-1)^{m-1}z^m(r_n)}{(1-2im\bar{\lambda}_u)^n}.$$

Так как $\lim_{n\to\infty}|1 - 2im\bar{\lambda}_u|^{-n} = 0$, $|z(r_n)| < 1$, то $\overline{s(r_0)}^{\infty} = 0$. Таким образом, бесконечнократное усреднение $S(r_0)$ приводит к матрице рассеяния

$$\overline{S(r_0)}^{\infty} = e^{i\pi\lambda - \pi\bar{\lambda}_u} = e^{2i\sigma_+} = S_+ = S(\lambda, -i\bar{\lambda}_u), \tag{15}$$

соответствующей парциальным волновым функциям

$$\overline{R(r)_{r_0}}^{\infty} = \bar{C}_+ R_+(r) = \bar{C}_+ R(kr, -i\bar{\lambda}_u), \ \bar{C}_+ = \overline{C_+(r_0)}^{\infty} = (2l+1)i^l e^{2i\sigma_+}. \tag{16}$$

С другой стороны, бесконечнократное усреднение волновых функций $R(r)_{r_0}$ (9) приводит к решению (16) с матрицей рассеяния (15).

Полученная матрица рассеяния (15) описывает поглощение (падение в центр) рассеиваемых частиц: $|\overline{S(r_0)}^{\infty}| = e^{-\pi\bar{\lambda}_u} < 1$. В классическом пределе, когда $\bar{\lambda}_u \to \infty$, поглощение становится полным, что соответствует классическому результату при $M < M_0$ ($\lambda < \gamma$).

5. Определим решение для исходного потенциала с помощью процедуры бесконечнократного усреднения решения для обрезанного потенциала по радиусу обрезания и в случае А ($\lambda \geq \gamma$), когда проблемы с выбором решения для исходного потенциала практически не возникает. Это существенно для последовательности рассмотрения, а также для демонстрации применимости предложенной процедуры нахождения решения и в обычных случаях.

Исходим из решения (9) для обрезанного потенциала, в котором будем рассматривать два вида второго линейно независимого решения для исходного потенциала.

а. В качестве $R_-(r)$ в (9) проще всего взять решение (5), применимое при $\lambda_u \neq n$. При этом матрица рассеяния (10) после подстановки соответствующих выражений для $\sigma_\pm$, α отличается от таковой в случае Б (11), (12) только заменой $-i\bar{\lambda}_u$ на λ_u, и соответственно имеем: $\alpha(r_0) \propto r_0^{2\lambda_u}$, $\lim_{r_0\to 0}\alpha(r_0) = 0$.

При такой зависимости от r_0 возможен переход к пределу при $r_0 \to 0$ для матрицы рассеяния (10) и решения (9), который сразу приводит к основному решению (4) для исходного потенциала с соответствующей матрицей рассеяния. Более сложная процедура бесконечнократного усреднения по r_0 приводит к такому же результату. При ее проведении учитывается, что условие $|z(r_n)| < 1$ выполняется за счет малости r_n, а замена $-i\bar{\lambda}_u$ на λ_u не меняет результата для $\overline{s(r_0)_{r_n}}^{n}$ при $n \to \infty$. Таким образом,

$$\overline{S(r_0)}^{\infty} = \lim_{r_0\to 0} S(r_0) = S_+ = e^{2i\sigma_+}, \quad \overline{R(r)_{r_0}}^{\infty} = \lim_{r_0\to 0} R(r)_{r_0} = \bar{C}_+ R_+(r). \tag{17}$$

Полученный результат (17) подтверждает правильность выбора решения для исходного потенциала и при $\lambda_u < 1/2$, когда выбор решения не является абсолютно очевидным из-за его расходимости при $r \to 0$.

б. Для снятия ограничения $\lambda_u \neq n$ в качестве второго линейно независимого решения в (9) можно взять $\tilde{R}_-(r)$ (6). Для простоты экзотический случай $\lambda_u = 0$ рассматривать не будем. При этом существенным отличием от случая а является появление в α множителя $-\sin\pi\lambda_u$, который устраняет полюса в α при $\lambda_u = 1, 2, \ldots$ и делает возможным рассмотрение таких λ_u (замена σ_- на $\tilde{\sigma}_-$ (6) не существенна). Окончательный результат (17) остается без изменения.

Таким образом, предложенная процедура бесконечнократного усреднения по радиусу обрезания r_0 решения $\Psi(\mathbf{r})_{r_0} = \sum\limits_{l=0}^{\infty} R^l(r)_{r_0} P_l(\cos\theta)$ для обрезанного при $r = r_0$ исходного потенциала приводит к однозначному решению лдя исходной задачи рассеяния. При $l > \gamma - 1/2$ полученные парциальные решения $\overline{R^l(r)_{r_0}}^{\infty} = \bar{C}^l_+ R(kr, \lambda_u)$ совпадают со стандартными решениями, описывающими рассеяние на исходном потенциале. При $l < \gamma - 1/2$ полученные решения $\overline{R^l(r)_{r_0}}^{\infty} = \bar{C}^l_+ R(kr, -i\bar{\lambda}_u)$ описывают наряду с рассеянием поглощение (падение в центр) частиц. В классическом пределе это поглощение становится полным, что совпадает с классическим результатом.

Предложенный метод однозначного определения решения задачи рассеяния в случае, когда невозможно использовать стандартные краевые условия при $r \to 0$, представляет интерес при рассмотрении сингулярных в нуле потенциалов. В частности, трудности, связанные с неоднозначностью выбора решения уравнения Клейна – Гордона в случае кулоновского взаимодействия точечных зарядов с абсолютной величиной зарядов, большей 137/2, могут быть устранены с его помощью.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Наука, 1989, с. 147.

[2] Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М., Мир, 1969, с. 366.

[3] Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., Мир, 1969, с. 46.

Институт ядерных исследований РАН Поступила в редакцию 3 апреля 1997 г.