УДК 539.17

О РАССЕЯНИИ НА СИНГУЛЯРНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ С ПОЛЮСОМ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА В ЦЕНТРЕ

В. И. Беляк

Показано, что неоднозначность выбора решения, возникающая в квантовой задаче рассеяния на сингулярном потенциале с полюсом третьего порядка в центре, может быть устранена с помощью обрезания потенциала и усреднения решения для обрезанного потенциала по радиусу обрезания на бесконечно малом интервале.

В квантовой задаче рассеяния частиц на сингулярных потенциалах, ведущих себя как $-a/r^n$ $(n \geq 2, a > 0)$ при $r \to 0$, возникает проблема выбора решения волнового уравнения, связанная с невозможностью использовать стандартные краевые условия при $r = 0$ [1 - 3]. В работе [4] для потенциала $-a/r^2$ эта проблема решалась введением более сложного краевого условия. А именно, решение задачи рассеяния определялось с помощью обрезания потенциала и бесконечнократного усреднения решения для обрезанного потенциала по радиусу обрезания на некотором малом интервале, включающем центр. В классическом пределе это решение приводило к классическому результату.

В настоящей работе рассматривается рассеяние частиц на сингулярном вещественном потенциале, имеющем в центре полюс третьего порядка и описывающем вблизи центра притяжение. По сравнению с предшествующим случаем [4] рассмотрение усложняется тем, что в нем явный вид независимых решений известен только в окрестности центра. Это, в частности, не позволяет переходить в получаемом решении к классическому пределу. Тем не менее на основе общих свойств решений можно ввести процедуру однозначного определения решения задачи рассеяния. Эта процедура оказывается более простой, чем в [4], и сводится к усреднению решения для соответствующего обрезанного потенциала по радиусу обрезания на некотором малом интервале, величина которого затем стремится к нулю. Полученное таким образом решение описывает, в частности, при всех орбитальных моментах поглощение (падение в центр) частиц. Для моментов, при которых центр классически не доступен, это объясняется проникновением частиц в центр через потенциальный барьер.

1. Перейдем к непосредственному рассмотрению рассеяния на указанном выше потенциале. В окрестности центра этот потенциал имеет вид

$$U(r) = -\sum_{n=-3}^{\infty} a_n r^n,\ a_n = \mathrm{Re}a_n,\ a_{-3} > 0. \tag{1}$$

(В случае $a_{-3} < 0$ проблем не возникает.) Полагаем, что при $r \to \infty$ потенциал убывает как $1/r$ или быстрее. Рассеяние частиц на потенциале (1) будем описывать уравнением Шредингера, которое запишем в виде

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

$$u(r) = -\sum_{n=-3}^{\infty} \alpha_n (kr)^n,\ \alpha_n = a_n/Ek^n,\ \alpha_{-3} \equiv \omega^2\ (\omega > 0),\ \alpha_{-2} \equiv \gamma^2. \tag{2}$$

Здесь k, E, m – волновое число, энергия и масса частиц. Для играющих далее основную роль величин α_{-3}, α_{-2} введены специальные обозначения.

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

$$[d^2/dr^2 + (2/r)d/dr + k^2(1 - u(r) - (\lambda^2 - 1/4)/k^2r^2)]R^l(r) = 0,\ \lambda = l + 1/2.$$

Это уравнение, вводя переменную $x = kr$, можно также записать в виде (индекс l и аргумент r или x далее часто будем опускать).

$$R'' + (2/x)R' + [\omega^2 x^{-3} - (\lambda_u^2 - 1/4)x^{-2} + \sum_{n=-1}^{\infty} \alpha_n x^n + 1]R = 0,\ \lambda_n^2 = \lambda^2 - \gamma^2. \tag{3}$$

Линейно независимые решения $R_\pm$ уравнения (3) могут быть представлены в окрестности центра в виде следующих асимптотических разложений:

$$R_\pm = x^{-1/4}\exp(\pm 2i\omega x^{-1/2})[1 + \sum_{n=1}^{\infty} b_n^\pm x^{n/2}],\ b_1^\pm = \pm i(\lambda_u^2 - 1/16)/\omega,\ b_n^- = (b_n^+)^*, \tag{4}$$

где $b_n^\pm$ находятся подстановкой (4) в (3) и приравниванием величин одного порядка по x.

Исходный вид разложений (4) и характер их сходимости определяется, в частности, приближенными решениями $R_\pm = \tilde{C}_\pm x^{-1/2} H^{1,2}_{2\lambda_u}(2\omega x^{-1/2})$, которые имеют место вблизи центра при учете величин $\propto x^{-3,-2}$ в уравнении (3) и первые члены разложений которых совпадают с первыми членами разложений (4) (с точностью до постоянных множителеей $\tilde{C}_\pm$).

Решения $R^l_\pm(r)$ при $r \to 0$ для всех l ведут себя согласно (4) однотипно (одинаково сингулярно), и не существует явного критерия, позволяющего выбрать одно из них или некоторую их суперпозицию для описания рассеяния[1]. Не известен и явный вид решений $R_\pm$ вне окрестности центра. Однако использование общих свойств решений позволит далее ввести процедуру однозначного определения решения рассматриваемой задачи рассеяния.

Перейдем к рассмотрению общих свойств решений. Решения $R^l_\pm$ (4) при $r \to \infty$ имеют вид

$$R^l_\pm = B^l_\pm(1/kr)\sin(\Phi^l_0 + \delta^l_\pm),\ S^l_\pm = \exp(2i\delta^l_\pm). \tag{5}$$

Здесь $\Phi^l_0 = kr - \pi l/2$ – фазы свободного движения, если $u(r)$ убывает быстрее чем $1/r$ при $r \to \infty$, и $\Phi^l_0 = kr - \eta \ln 2kr - \pi l/2$ – искаженные фазы свободного движения, если $u(r) \to 2\eta/kr$ при $r \to \infty$; $\delta^l_\pm$ – сдвиги фаз рассеяния.

Общее решение с учетом (5) можно представить в виде

$$R(r) = C_+R_+(r) + C_-R_-(r) \to A(1/kr)\sin(\Phi_0 + \delta) \text{ при } r \to \infty,$$

$$S = e^{2i\delta} = \frac{e^{i\delta_+} + \alpha e^{i\delta_-}}{e^{-i\delta_+} + \alpha e^{-i\delta_-}},\ \alpha = \beta C,\ \beta = \frac{B_-}{B_+},\ C = \frac{C_-}{C_+}, \tag{6}$$

где $C_\pm \equiv C^l_\pm$ – произвольные коэффициенты, $A \equiv A^l = (2l+1)i^l \exp(i\delta^l)$ определяются самой задачей рассеивания.

Далее будем использовать следующие свойства решений: а) $R_- = R^*_+$ при всех r, что следует из справедливости этого соотношения для асимптотических разложений $R_\pm$ (4) и из того, что $R_\pm$ – решения одного и того же дифференциального уравнения, причем с вещественными коэффициентами; б) $R_\pm$ описывают соответственно поглощение (падение в центр) и испускание частиц, в чем можно убедиться, вычислив на основе (4) полный поток частиц с моментом l в центр. Из этих свойств решений получаем

[1] Для отталкивательного вблизи центра потенциала, когда $\omega^2 < 0$, $\omega = \pm i\bar{\omega}$, $\bar{\omega} > 0$, имеем $R_+(0) = 0$, $R_-(0) = \infty$, и R_+ описывает рассеяние.

$$\delta_\pm = \bar{\delta} \pm i\Delta, \Delta > 0, \ \mathrm{Re}\delta_\pm = \bar{\delta}, \ B_- = B_+^*. \tag{7}$$

Для общего решения матрица рассеяния S (6) может принимать любые значения, причем и в случае (7). В этом случае матрица рассеяния описывает поглощение, если $|C| < 1$, и испускание, если $|C| > 1$. Соответственно естественное требование отсутствия испускания не достаточно для выбора определенного решения, например, R_+.

2. С целью однозначного определения решения используем метод обрезания потенциала. А именно, рассмотрим рассеяние на исходном потенциале $u(r)$, обрезанном при достаточно малом радиусе r_0:

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

А затем установим связь между решениями задач рассеяния на исходном и обрезанном потенциале. (В частности, решения, описывающие рассеяние на отталкивательных вблизи центра и несингулярных потенциалах, являются пределом при $r_0 \to 0$ решений на соответствующих обрезанных потенциалах.)

Задача рассеяния на обрезанном потенциале (8) решается однозначно и описывается парциальными решениями $R(r)_{r_0}$, имеющими при $r \ge r_0$ вид (6), в котором $R(r)$ заменено на $R(r)_{r_0}$, а величины $C = C(r_0)$ определяются из сшивания решений при $r = r_0$. Величины $C(r_0)$ (вместе с $\delta_\pm, B_\pm$) полностью определяют матрицу рассеяния $S = S(r_0)$, причем зависимость от r_0 входит в $S(r_0)$ только через $C(r_0)$. Коэффициенты $C_\pm = C_\pm(r_0)$ с помощью известных значений A (6) могут быть определены и по отдельности

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

Отсюда видно, что матрица рассеяния $S(r_0)$ входит в волновую функцию $R(r)_{r_0}$ линейно при всех $r \ge r_0$, и только через нее эта волновая функция зависит от r_0. Благодаря этому проводимые далее операции с волновой функцией и матрицей рассеяния оказываются эквивалентными.

Для обрезанного потенциала (8), соответствующего исходному (1), (2), коэффициенты $C(r_0)$ в рамках учета первой поправки по r_0 имеют вид

$$\begin{gathered} C(r_0) = (-1)^{l+1} \exp(6iy_0)[1 + O_1], O_1 = (i/y_0)(d_1 + d_2 \cos 2y_0), \\ y_0 = \omega x_0^{-1/2}, \ x_0 = kr_0, \ d_1 = 3\lambda^2 - \gamma^2 + 3/8, \ d_2 = (3/4)(-1)^{l+1}. \end{gathered} \tag{9}$$

Заметим, что для обрезанного потенциала $|S| = 1$ и соответственно $|\alpha| = 1$, а с учетом (7) и $|C| = 1$. Последнее условие выполняется для (9) в рамках рассматриваемого приближения.

Матрица рассеяния $S(r_0)$, получаемая для рассматриваемой задачи подстановкой (9) в (6), не имеет предела при $r_0 \to 0$ и ее зависимость от r_0 оказывается очень сильной. Это обусловлено тем, что величина $\alpha(r_0) \propto C(r_0)$ в $S(r_0)$ при $r_0 \to 0$ осциллирует без затухания, принимая, в частности, бесконечное число раз значение ± 1. Соответственно при $r_0 \to 0$ осциллирует и матрица рассеяния $S(r_0)$, принимая при $\alpha = \pm 1$ значения $\pm \exp(2i\bar{\delta})$. Аналогично зависит от r_0 и волновая функция $R(r)_{r_0}$.

Таким образом, простейший способ связи решений для исходного и обрезанного потенциала (переход к пределу при $r_0 \to 0$) в случае рассматриваемого потенциала (1), (2) не применим.

3. С целью установления связи между решениями на исходном и обрезанном потенциале усредним волновую функцию $R(r)_{r_0}$ по радиусу обрезания r_0 на достаточно малом интервале (or_1) при $r \geq r_1$. Это сводится к соответствующему усреднению матрицы рассеяния $S(r_0)$. Последнее удобно проводить, исходя из следующей записи S (учитывающей (7)):

$$S = S_+[1 + (e^{4\Delta} - 1)s], \; s = z_0/(1 + z_0), \; z_0 = z(r_0) = \beta e^{-2\Delta} C(r_0), \, |z_0| = e^{-2\Delta} < 1. \quad (10)$$

При этом среднее от S по r_0 на (or_1) можно представить в виде

$$\bar{S}_{r_1} \equiv \overline{S(r_0)_{r_1}} = \frac{1}{r_1} \int\limits_0^{r_1} S(r_0) dr_0 = S_+[1 + (e^{4\Delta} - 1)\bar{s}_{r_1}],$$
$$\bar{s}_{r_1} \equiv \overline{s(r_0)_{r_1}} = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \beta^m e^{-2m\Delta} \overline{C^m(r_0)_{r_1}}. \quad (11)$$

Из (11) видно, что в основе рассматриваемых средних лежат величины

$$\overline{C^m(r_0)_{r_1}} = (i/3my_1) C^m(r_1)[1 + \bar{O}_{1m}], \; \bar{O}_{1m} = O(1/y_1), \; y_1 = \omega x_1^{-1/2}, \; x_1 = kr_1. \quad (12)$$

С учетом (11), (12) получаем усредненную матрицу рассеяния

$$\bar{S}_{r_1} = S_+[1 + (e^{4\Delta} - 1)\bar{s}_{r_1}], \; \bar{s}_{r_1} = (1/3y_1)[\ln(1 + z_1) + \bar{O}_{1s}],$$
$$\bar{O}_{1s} = O(1/y_1), \; z_1 = z(r_1) = \beta e^{-2\Delta} C(r_1), \; |z_1| = e^{-2\Delta} < 1. \quad (13)$$

Величины поправок первого порядка малости по $1/y_1$ в (12), (13) приведены ниже в п. 4 (16), (17) (где они соответствуют $n = 1$) и (18).

Усредненная матрица рассеяния $\overline{S_{r_1}}$ (13) имеет предел при $r_1 \to 0$:

$$\bar{s}_0 = \lim_{r_1 \to 0} \bar{s}_{r_1} = 0, \; \bar{S}_0 = \lim_{r_1 \to 0} \bar{S}_{r_1} = S_+ = e^{2i\bar{\delta} - 2\Delta}. \tag{14}$$

Таким образом, усреднение матрицы рассеяния $S(r_0)$ по r_0 на $(0r_1)$ с последующим переходом к пределу при $r_1 \to 0$ приводит к матрице рассеяния S_+, определяющей решение C_+R_+, $C_+ = (1/B_+)(2l+1)i^l \exp(i\delta_+)$. С другой стороны, указанная процедура, непосредственно примененная к волновой функции $R(r)_{r_0}$ $(r \geq r_1)$, приводит к решению C_+R_+ с матрицей рассеяния S_+. Итак, установлена связь между решениями на обрезанном и исходном потенциале, однозначно определяющая решение на исходном потенциале. Полученное решение описывает поглощение (падение в центр) частиц при всех орбитальных моментах. Для моментов, при которых центр классически не доступен, это происходит благодаря проникновению частиц в центр через потенциальный барьер.

4. В дополнение к изложенному рассмотрим бесконечнократное усреднение по радиусу обрезания r_0 на достаточно малом отрезке $(0\bar{r})$ волновой функции $R(r)_{r_0} (r \geq \bar{r})$, т.е. матрицы рассеяния $S(r_0)$, поскольку такая процедура для рассеяния на потенциале $\propto 1/r^2$ приводит к однозначному определению решения [4].

Под бесконечнократным усреднением $f(r_0)$ по r_0 на $(0\bar{r})$ [4] понимается n-кратное усреднение $f(r_0)$ на $(0\bar{r})$ и переход к пределу при $n \to \infty$:

$$\overline{f_{r_1}}^1 \equiv \overline{f(r_0)_{r_1}}^1 = \frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} f(r_0)dr_0, \ldots \overline{f_{r_n}}^n \equiv \overline{f(r_0)_{r_n}}^n = \frac{1}{r_n}\int_0^{r_n} \overline{f(r_0)_{r_{n-1}}}^{n-1} dr_{n-1},$$

$$\overline{f}^\infty \equiv \overline{f(r_0)}^\infty = \lim_{n\to\infty} \overline{f_{r_n}}^n \quad (r_n \leq \bar{r}).$$

(В п. 3 верхний индекс $n = 1$ опускался.) Указанную процедуру для матрицы рассеяния S начнем с ее n-кратного усреднения

$$\overline{S_{r_n}}^n = S_+[1 + (e^{4\Delta} - 1)\bar{s}^n_{r_n}], \; \bar{s}^n_{r_n} = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1}\beta^m e^{-2m\Delta} \overline{C^m(r_0)_{r_n}}^n. \tag{15}$$

В основе получаемых ниже результатов лежат величины

$$\overline{C^m(r_0)_{r_n}}^n = (i/3my_n)^n C^m(r_n)[1 + \bar{O}_{nm}], \; y_n = \omega x_n^{-1/2}, \; x_n = kr_n,$$

$$\bar{O}_{nm} = \frac{-i}{2y_n}\left\{\frac{n^2+5n}{6m} + md_2\left[\left(1-\left(\frac{m}{m+1/3}\right)^n\right)e^{2iy_n} - \left(\left(\frac{m}{m-1/3}\right)^n - 1\right)e^{-2iy_n}\right]\right\}. \quad (16)$$

Здесь и далее результаты приводятся с учетом величин первого порядка малости по $1/y_n$. При этом коэффициенты $C(r_n)$ (9) в основном члене уже содержат такие величины. С помощью (16) получаем

$$\bar{s}^n_{r_n} = (i/3y_n)^n[-Li_n(-z_n) + \bar{O}_{ns}],\ z_n = z(r_n) = \beta e^{-2\Delta}C(r_n),\ |z_n| = e^{-2\Delta} < 1,$$

$$\bar{O}_{ns} = \frac{i}{2y_n}\left\{\frac{n^2+5n}{6}\mathrm{Li}_{n+1}(-z_n) - d_2\sum_{\nu=\pm1}[\mathrm{Li}^1_n(-z_n,\nu/3) - \mathrm{Li}_{n-1}(-z_n)]e^{2i\nu y_n}\right\}, \quad (17)$$

$$\mathrm{Li}^k_n(x,v) = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{m^k x^m}{(m+v)^n}\ (|x|<1),\ \mathrm{Li}_n(x) = \mathrm{Li}^0_n(x,0).$$

В случае однократного усреднения поправочный член имеет вид

$$\bar{O}_{1s} = \frac{i}{2y_1}\left\{\mathrm{Li}_2(-z_1) + \frac{d_2}{3}[\mathrm{Li}^0_1(-z_1,1/3)e^{2iy_1} - \mathrm{Li}^0_1(-z_1,-1/3)e^{-2iy_1}]\right\}. \quad (18)$$

Выражения (15), (17) определяют $\overline{S_{r_n}}^n$. Как и в случае $n=1$, имеем

$$\bar{s}^n_0 = \lim_{r_n\to0}\bar{s}^n_{r_n} = 0,\ \overline{S_0}^n = \lim_{r_n\to0}\overline{S_{r_n}}^n = S_+.$$

Считаем $n \gg 1$ и отбрасываем в основном члене и поправке экспоненциально малые по сравнению с учитываемыми величины. В этом приближении

$$\bar{s}^n_{r_n} = (i/3y_n)^n z_n[1+\bar{O}_{n1}] = \beta e^{-2\Delta}\overline{C(r_0)_{r_n}}^n,$$

$$\bar{O}_{n1} = (i/2y_n)[-(n^2+5n)/6 - 2d_2\cos 2y_n + d_2(3/2)^n\exp(-2iy_n)]. \quad (19)$$

Переходя в (15), (19) к пределу при $n\to\infty$, имеем

$$\bar{s}^{\infty} = \lim_{n\to\infty}\bar{s}^n_{r_n} = 0,\ \overline{S}^{\infty} = \lim_{n\to\infty}\overline{S_{r_n}}^n = S_+. \quad (20)$$

Таким образом, бесконечнократное усреднение матрицы рассеяния $S(r_0)$ и соответственно $R(r)_{r_0}$ $(r \ge \bar{r})$ по радиусу обрезания r_0 на $(o\bar{r})$ в рамках учета поправок первого порядка малости по $r_n \le \bar{r}$ приводит к такому же результату, как и однократное усреднение по r_0 на (or_1) с переходом к пределу при $r_1 \to 0$ (14).

Однако переход к пределу при $n \to \infty$ (20) проведен (см. выше) в рамках учета первых двух членов асимптотических разложений $\overline{s(r_0)_{r_n}}^{n}$ и $\overline{S(r_0)_{r_n}}^{n}$ по r_n (17), (19), а для разложений в целом он не является строго математически обоснованным из-за бесконечного роста при $n \to \infty$ относительных величин членов этих разложений.

Отметим, что указанного осложнения можно избежать, если исходно несколько видоизменить саму процедуру бесконечнократного усреднения и по определению после каждого усреднения отбрасывать величины, бесконечно малые по величине интервала усреднения по сравнению с основными. С другой стороны, вопрос о математической строгости перехода к пределу при $n \to \infty$ не столь существенен, так как результат перехода получен ранее (14) другим, причем строгим способом.

5. Таким образом, в работе рассмотрены способы однозначного определения решения задачи рассеяния на потенциале с полюсом третьего порядка в центре. Простейшим способом такого определения оказывается усреднение решения для соответствующего обрезанного потенциала по радиусу обрезания на некотором малом интервале около центра с последующим переходом к пределу при стремлении величины интервала к нулю. Этот способ (как можно показать) применим и в случае рассеяния на потенциалах с полюсами выше третьего порядка. Поскольку в предшествующей работе [4] однозначно определено решение для рассеяния на потенциале с полюсом второго порядка, то тем самым для сингулярных потенциалов с полюсами произвольного порядка указаны способы однозначного определения решения, описывающего рассеяние.

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.

[4] Беляк В. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5 – 6, 80 (1997).

Институт ядерных исследований РАН Поступила в редакцию 16 июня 1998 г.