Лекция 12
Квантовая теория рассеяния

1 Вычисление амплитуды рассеяния по теории возмущений

Теперь займемся вычислением амплитуды рассеяния. С этой целью в правую часть уравнения (11.18) подставим в качестве $\psi(\vec{r})$ само это выражение. В результате получим

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \varphi_k(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\frac{\exp\{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|\}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}V(\vec{r}\,')\varphi_k(\vec{r}\,') + \\ &+ \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int d^3r'\frac{\exp\{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|\}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}V(\vec{r}\,')\int d^3r''\frac{\exp\{ik|\vec{r}\,'-\vec{r}\,''|\}}{|\vec{r}\,'-\vec{r}\,''|}V(\vec{r}\,'')\psi_k(\vec{r}\,'').\end{aligned} \tag{1}$$

Далее эту процедуру можно продлить. Подставляя это выражение в выражение (11.21) для амплитуды рассеяния, получим

$$\begin{aligned}A(E,\theta) = &- \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} < \varphi_{\vec{k}\,'}|V|\varphi_{\vec{k}} > + \\ &+ \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int d^3r d^3r'\varphi^*_{\vec{k}\,'}(\vec{r})V(\vec{r})\frac{\exp\{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|\}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}V(\vec{r}\,')\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') + \ldots\end{aligned} \tag{2}$$

Полученное разложение называют *борновским рядом.* Часто первый член этого ряда называют просто *борновским приближением*

$$A^{(\text{Б})}(E,\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|V|\varphi_{\vec{k}}\rangle. \tag{3}$$

Соответственно дифференциальное сечение в борновском приближении имеет вид

$$\frac{d\sigma^{(\text{Б})}}{d\Omega} = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left|\langle\varphi_{\vec{k}\,'}|V|\varphi_{\vec{k}}\rangle\right|^2. \tag{4}$$

В случае центрально–симметричного поля в выражении (3) можно произвести интегрирование по угловым переменным

$$A^{(\text{Б})}(E,\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r e^{i\vec{q}\vec{r}}V(r) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty drr\frac{\sin qr}{q}V(r), \tag{5}$$

где

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}\,',\ q \equiv |\vec{q}| = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta} = 2k\sin\frac{\theta}{2}. \tag{6}$$

Величина $\hbar q$ представляет собой импульс переданный рассеивающейся частице. В связи с тем, что переданный импульс и угол рассеяния однозначно связаны, часто представляют амплитуду рассеяния не как функцию θ, а как функцию переданного импульса $A(k,q)$.

При нулевом переданном импульсе $q = 0$ амплитуда рассеяния бесконечна, если потенциал $V(r)$ убывает на бесконечности как r^{-1} или медленнее. В частности это имеет место для кулоновского потенциала. Поэтому этот случай требует особого рассмотрения, что будет сделано несколько ниже.

Если k мало, то q тоже мало и $e^{i\vec{q}\vec{r}} \approx 1$. В этом случае амплитуда рассеяния изотопна и не зависит от энергии.

Если k велико, то при условии

$$\theta \gg \frac{1}{kd} \tag{7}$$

синус в интеграле (5) начинает быстро осциллировать и амплитуда рассеяния начинает резко убывать. Поэтому при высоких энергиях дифференциальное сечение резко возрастает при малых углах рассеяния.

Оценим область применяемости борновского приближения. Оно, очевидно, выполняется, если

$$\left|\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})\right| \gg \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left|\int d^3r' \frac{\exp\{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|\}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} V(r')\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')\right| \tag{8}$$

Обычно потенциал $V(r)$ максимален при $r=0$. Поэтому положим в этом условии $r=0$ и проинтегрируя полученное условие по углам

$$1 \gg \frac{\mu}{k\hbar^2}\left|\int_0^\infty dr' \left(e^{2ikr'}-1\right) V(r')\right|. \tag{9}$$

Рассмотрим отдельно случаи низких и высоких энергий столкновения. При низких энергиях k мало и экспоненту можно разложить в ряд. В результате (9) сведется к

$$1 \gg \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left|\int d^3r' \frac{V(r')}{r'}\right| = \frac{\mu\overline{V}d^2}{\hbar^2} \text{ или } \overline{V} \ll \frac{\hbar^2}{\mu d^2}. \tag{10}$$

Если $kd \gg 1$, то в правой части экспоненту можно опустить. В результате получим

$$\overline{V} \ll \frac{\hbar^2 k}{\mu d}. \tag{11}$$

2 Метод парциальных волн

Обсудим более подробно случай рассеяния на центрально–симметричном потенциале. В этом случае момент количества движения является интегралом движения и функцию $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ удобно предствить в виде суммы волновых функций обладающих определенным орбитальным моментом $\hbar\ell$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\ell,m} \widetilde{\Phi}_{\vec{k}\ell,m}(r) Y_{\ell,m}(\theta,\varphi). \tag{12}$$

Далее будем выбирать ось z системы координат вдоль волнового ветора $\vec{k}$. В этом случае наша задача обладает аксиальной симметрией и, следовательно, не зависит от угла φ. Это означает, что все функции $\widetilde{\Phi}_{\vec{k}\ell,m}(r)$ с $m \neq 0$ следует положить равными нулю. Далее, ввиду того, что

$$Y_{\ell,0}(\theta,\varphi) \sim P_\ell(\cos\theta) \tag{13}$$

уравнение (12) сведется к [1]

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \Phi_{\vec{k}\ell}(r) P_\ell(\cos\theta). \tag{14}$$

Отдельные члены этого ряда называют *парциальными волнами.* Подставляя это выражение в уравнение Шредингера и записывая последнее в сферических координатах получим

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) + k^2\right] \Phi_{\vec{k},\ell}(r) = 0. \tag{15}$$

Рассмотрим сначала случай, когда взаимодействие выключено. В этом случае решениями уравнения (15) будут сферические функции Бесселя первого и второго рода $j_\ell(kr)$ и $y_\ell(kr)$. Их явный вид можно получить, например, пользуясь формулами Релея[2]

$$j_\ell(x) = x^\ell \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\sin x}{x} \tag{16}$$

$$y_\ell(x) = -x^\ell \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\cos x}{x}. \tag{17}$$

Разложим плоскую падающую волну $e^{ikr\cos\theta}$ по парциальным волнам. Отметим, что плоская волна не имеет особенностей, в то время как функции $y_\ell(kr)$ имеют особенность в точке $r = 0$. Поэтому разложение имеет вид

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta), \tag{18}$$

где c_ℓ некоторые коэффициенты, которые предстоит определить. Для простоты введем обозначения

$$\rho \equiv kr, \quad u \equiv \cos\theta. \tag{19}$$

Продифференцируем правую и левую части (18) по $d\rho$. В результате получим

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell j'_\ell(\rho) P_\ell(u) = i \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell j_\ell(\rho) u P_\ell(u). \tag{20}$$

Используя свойства полиномов Лежандра (8.34) и сферических функций Бесселя

$$j_\ell(\rho) = \frac{1}{2\ell+1}\left[j_{\ell+1}(\rho) + j_{\ell-1}(\rho)\right]$$
$$j_{\ell-1}(\rho) = j'_\ell(\rho) + \frac{\ell+1}{\rho} j_\ell(\rho), \tag{21}$$

[1] Можно записать это выражение и в произвольной системе. Для этого следует воспользоваться теоремой сложения $P_\ell(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y^*_{\ell,m}(\vec{k}/k) Y_{\ell,m}(\vec{r}/r)$. Тогда

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell,m} \frac{1}{2\ell+1} \Phi_{\vec{k}\ell,m}(r) Y^*_{\ell,m}(\vec{k}/k) Y_{\ell,m}(\vec{r}/r),$$

где единичные векторы $\vec{k}/k$ и $\vec{r}/r$ задают соответствующие полярные и азимутальные углы.

[2] Более подробно см. Справочник по специальным функциям под ред. М. Абловица и И. Стиган. М.:“Наука”, 1979 г.

сведем (20) к следующему уравнению

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell \left[\frac{\ell}{2\ell+1} j_\ell(\rho) - \frac{\ell+1}{2\ell+1} j_{\ell+1}(\rho)\right] P_\ell(u) =$$
$$= i \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{\ell}{2\ell-1} c_{\ell-1} j_{\ell-1}(\rho) + \frac{\ell+1}{2\ell+3} c_{\ell+1} j_{\ell+1}(\rho)\right] P_\ell(u). \tag{22}$$

Откуда следует рекурентное соотношение для коэффициентов

$$c_{\ell+1} = i \frac{2\ell+3}{2\ell+1} c_\ell. \tag{23}$$

Чтобы найти c_0 рассмотрим значение плоской волны в точке $r = 0$. Используя поведени функций Бесселя при $\rho \to 0$

$$j_\ell(\rho) \approx \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \tag{24}$$

получим, что

$$c_0 = 1. \tag{25}$$

Следовательно полская падающая волна имеет следующее разложение по парциальным волнам

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta). \tag{26}$$

Таким образом радиальные парциальные волны в этом случае суть

$$\Phi^{(0)}_{\vec{k},\ell}(r) = (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr). \tag{27}$$

Рассмотрим поведение парциальных волн при $z \to \infty$. С этой целью воспользуемся асимптотическим поведением функций Бесселя

$$j_\ell(x) \approx \frac{\sin\left(x - \frac{\pi}{2}\ell\right)}{x}, \ x \gg 1 \tag{28}$$

и получим, что падающая плоская волна (26) распадается на сходящуюся и расходящуюся от центра сферические волны

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right) P_\ell(\cos\theta) = \tag{29}$$
$$= \frac{1}{2kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell+1} \left[e^{-i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} - e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)}\right] P_\ell(\cos\theta). \tag{30}$$

Перейдем теперь к рассмотрению случая, когда $V(r) \neq 0$. Мы интересуемся решением, которое при $z \to \infty$ представляет собой сумму падающей плоской волны с расходящейся от центра сфкрической волной. Это означает, что в (30) необходимо изменить амплитуду у второй экспоненты

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{2kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell+1} \left[e^{-i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)} - S_\ell e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right)}\right] P_\ell(\cos\theta) = \tag{31}$$
$$= \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \left[\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right) + \frac{i}{2}\left(1 - S_\ell e^{ikr}\right)\right] P_\ell(\cos\theta), \text{ при } kr \gg 1. \tag{32}$$

Таким образом амплитуда рассеяния есть

$$A(E,\theta) = \frac{i}{2k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\,(1-S_\ell)\,P_\ell(\cos\theta). \tag{33}$$

Коэффициенты S_ℓ целиком определяют амплитуду рассеяния. Их называют диагональными элементами *матрицы рассеяния* в состоянии с орбитальным моментом ℓ. Матрица рассеяния зависит от энергии E и является в общем случае комплексной величиной.

Диагональные элементы матрицы рассеяния можно записать через действительные величины δ_ℓ, которые называют *фазовыми сдвигами*

$$S_\ell = e^{2i\delta_\ell}. \tag{34}$$

Действительно в этом случае (31) можно переписать

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{kr}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell\left[\sin\left(kr-\frac{\pi}{2}\ell+\delta_\ell\right)\right]P_\ell(\cos\theta), \tag{35}$$

откуда видно, что при $r\to\infty$ соответствующие парциальные волны удовлетворяет уравнению Шредингера.

Амплитуда рассеяния, записанная через фазовые сдвиги, имеет вид

$$A(E,\theta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell. \tag{36}$$

Теперь легко найти дифференциальное сечение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\sum_{\ell,\ell'}(2\ell+1)(2\ell'+1)P_\ell(\cos\theta)P_{\ell'}(\cos\theta)\sin\delta_\ell\sin\delta_{\ell'}\cos(\delta_\ell-\delta_{\ell'}). \tag{37}$$

Если проинтегрировать это выражение по $d\Omega$, то получим *интегральное сечение*

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sigma_\ell, \tag{38}$$

где

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \tag{39}$$

называют *парциальным сечением* с орбитальным мометном ℓ. Очевидно, что парциальное сечение не может превышать

$$\sigma_\ell^{\mathrm{max.}} = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1). \tag{40}$$

С другой стороны, мнимая часть ампилтуды рассеяния при $\theta=0$ равна

$$\mathrm{Im}A(E,0) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell, \tag{41}$$

откуда заключем, что

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}A(0). \tag{42}$$

Это соотношение называют *оптической теоремой*.

Оценим какие парциальные волны участвуют в рассеянии. Если частица находится вне действия сил ($r > d$), то на нее только действуют силы центробежного отталкивания с потенциальной энергией $\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}$. Поэтому частица обладающая энергией E будет "двигаться" на расстояниях r, определяемых неравенством

$$\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \leq \frac{h^2 k^2}{2\mu}, \tag{43}$$

или

$$r \geq r_\ell = \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{k}. \tag{44}$$

Если радиус действия сил $d < r_\ell$, то соответствующие парциальные волны не будут попадать под действие потенциала рассеяния и, следовательно, не будут участвовать в рассеянии. Значит вклад в рассеяние будут давать только парциальные волны с орбитальным квантовым числом ℓ определяемым из неравенства

$$\sqrt{\ell(\ell+1)} < kd \tag{45}$$

В частности, по этой причине при низких энергиях рассеяние происходит в s-волне и дифференциальное сечение имеет сферически–симетричный характер.