ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНИКА
Кафедра фізики і хімії твердого тіла

ВОЗНЯК О.М., ГОРІЧОК І.В., НИКИРУЙ Л.І.

ЗАСТОСУВАННЯ ТЕОРІЇ S-МАТРИЦІ РОЗСІЮВАННЯ ДО АНАЛІЗУ РЕЗОНАНСНИХ ПОТЕНЦІАЛІВ

(Навчальні матеріали з підготовки фахівців
за магістерською програмою зі спеціальностей
104 – "фізика та астрономія" та
105 – "прикладна фізика і наноматеріали")

ІВАНО-ФРАНКІВСЬК - 2018

Зміст

1 Вступ

. У будь-якому експерименті, пов'язаному із розсіюванням, частинки пучка детектуються після розсіювання мішенню. Взаємодія пучка із мішенню відбувається у невеликій області простору. Область простору, у якій пучки формують, і область, у якій пучки детектують, знаходяться далеко одна від одної. Це дає підстави стверджувати, що як у початковому так і у кінцевому стані частинки пучка вважаються вільними. Тому процеси розсіювання це – процеси переходу даної частинки із одного вільного стану у інший вільний стан внаслідок взаємодії у обмеженій області простору. Часто замість часового опису задачі розсіювання зручно розглядати еквівалентну стаціонарну задачу. При такому підході припускають, що існує неперервний потік, який налітає із нескінченності та внаслідок взаємодії із розсіюючим центром переходить у потік частинок, що розлітаються (розсіювання частинок).

Вільна частинка, що рухається у додатному напрямку осі OZ описується плоскою хвилею

$$\psi = \exp{(ikz)} = \exp{(ikr\cos\vartheta)} = \exp{(ikr\zeta)}, \text{ де } \zeta = \cos(\vartheta),$$

що відповідає густині потоку рівній швидкості частинки v.

Розсіяні у центрально симетричному полі $U(r)$ частинки далеко від розсіюючого центру описуються розбіжною сферичною хвилею

$$f(\vartheta)\frac{\exp{(i\vec{k}\vec{r})}}{r},$$

де ϑ – кут розсіювання, $f(\vartheta)$ називають амплітудою розсіювання.

Отже, розв'язок рівняння Шредингера, що описує процес розсіювання у центрально симетричному полі на великих відстанях від розсіюючого центру, повинен мати такий асимптотичний вигляд

$$\psi|_{r\to\infty} \approx \exp{(ikz)} + f(\vartheta)\frac{\exp{(i\vec{k}\vec{r})}}{r}. \tag{1}$$

2 Метод парціальних хвиль

.

2.1 Метод парціальних хвиль для плоскої хвилі

.

Для сферично-симетричного потенціалу момент імпульсу є інтегралом руху, тому стани, які відповідають різним значенням кутового момента, розсіюються незалежно. Відповідно падаючу плоску хвилю зручно представити у вигляді суперпозиції парціальних хвиль, що відповідають кожному моменту імпульсу, тобто розкласти її по повній системі сферичних функцій $P_l(\zeta)$

$$\exp{(i\vec{k}\vec{r})} = \exp{(ikr\zeta)} = \Sigma_l u_l P_l(\zeta), \quad \zeta = \cos(\vartheta). \tag{2}$$

Умова ортогональності сферичних функцій

$$\int_{-1}^{1} P_l P_{l'} d\zeta = \frac{2}{2l+1}. \tag{3}$$

Коефіцієнти розкладу u_l можна знайти інтегруванням (1) по $P_l(\zeta)d\zeta$

$$\int_{-1}^{1} P_l \exp{(ikr\zeta)} d\zeta = \sum_l u_l \int_{-1}^{1} P_l(\zeta) P_{l'}(\zeta) d\zeta = u_l \frac{2}{2l+1}. \tag{4}$$

Використаємо метод інтегрування частинами

$$\int_{-1}^{1} P_l \exp{(ikr\zeta)} d\zeta = \begin{vmatrix} u = P_l\zeta & du = \frac{P_l(\zeta)}{d\zeta} d\zeta \\ dv = \exp{(1kr\zeta)}d\zeta & v = \frac{\exp{(ikr\zeta)}}{ikr} \end{vmatrix} =$$
$$\frac{P_l(\zeta)}{ikr} \exp{(ikr)}\Big|_{-1}^{1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^{1} \exp{(ikr\zeta)} \frac{dP_l(\zeta)}{d\zeta} d\zeta.$$

Послідовне інтегрування правої сторони рівняння частинами дає розклад за степенями $1/r$. Основний внесок при $r \to \infty$ дає перший доданок. Тоді враховуючи, що $P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l$, $P_l(-x) = P_l(x)$ одержимо

$$\int_{-1}^{1} P_l(\zeta) \exp{(ikr\zeta)} d\zeta \Big|_{r\to\infty} = \frac{P_l(\zeta)}{ikr} \exp{(ikr)}\Big|_{-1}^{1} =$$
$$\frac{1}{ikr} \left(\exp{(ikr)} - (-1)^l \exp{(-ikr)} \right).$$

Відповідно

$$\begin{aligned} u_l =& \frac{2l+1}{2} \frac{1}{ikr} \left[\exp{(ikr)} - (-1)^l \exp{(-ikr)} \right] = \\ & \frac{2l+1}{2} \frac{i^l}{ikr} \left[\exp{(ikr - \frac{\pi}{2} l)} - \exp{(-ikr + \frac{\pi}{2} l)} \right]. \end{aligned} \tag{5}$$

$\pi/2l$ одержують при l - кратному диференціюванні синуса, оскільки кожне диференціювання d/dr синуса додає $\pi/2$ до його аргументу. Остаточно маємо

$$\begin{aligned}\exp(ikz) \to \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} i^l P_l(\zeta) \Big[\exp(i(kr - \frac{\pi}{2}l)) - \exp(-i(kr - \frac{\pi}{2}l))\Big] = \\ \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} i^l P_l(\zeta) \Big[\cos(kr - \frac{\pi}{2}l) + i\sin(kr - \frac{\pi}{2}l) - \\ \cos(kr - \frac{\pi}{2}l) + i\sin(kr - \frac{\pi}{2}l)\Big] = \\ \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} i^l P_l(\zeta) \sin(kr - \frac{\pi}{2}l).\end{aligned} \tag{6}$$

Отже, плоску хвилю можна розкласти на суму збіжної і розбіжної хвиль.

2.2 Метод парціальних хвиль для хвильової функції сферичного потенціала

Розв'язок рівняння Шредингера

$$\left(\triangle + k^2\right)\psi(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)\psi(r), \tag{7}$$

яке описує розсіювання частинок у центрально-симетричному полі $V(r)$ зі скінченим радіусом дії, також розкладемо по повній системі сферичних функцій

$$\psi(r) = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\zeta) R^l(r). \tag{8}$$

Перейшовши до сферичної системи координат у рівнянні Шредингера, одержимо

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right) R(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) R(r). \tag{9}$$

Хвильова функція $R(r)$ повинна бути скінченою при $r \to 0$. Тому на неї слід накласти таку граничну умову

$$P_l(0) = 0. \tag{10}$$

Якщо потенціал $V(r)$ при $r \to 0$ змінюється не швидше, ніж $1/r$, то при $r \to 0$ рівняння Шредінгера переходить у

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R(r) = 0. \tag{11}$$

Розв'язком цього рівняння при $r \to 0$ є $R_l(r) \sim r^{l+1}$. Підставивши цей розв'язок у рівняння (11), переконуємося у тому, що $R_l(r) \sim r^{l+1}$ справді є його розв'язком.

Нас цікавитимуть такі розв'язки (9), які на великих відстанях від розсіюючого центра є суперпозицією радіальної частини парціальної хвилі, якій відповідає квантове число l у падаючій хвилі і поширюється від центра розсіяних хвиль. Взаємодія потоку падаючих частинок із розсіюючим полем змінить лише амплітуду хвиль, що поширюються від центра. Тому асимптотичне значення радіальної функції $R_l(r)$ у рівнянні (9) можна записати

$$\begin{gathered} R_l(r) = \frac{1}{2}\left\{\exp -(i(kr - \frac{\pi}{2}l)) - S_l \exp\left(i(kr - \frac{\pi}{2}l)\right)\right\} = \\ \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) + \frac{i}{2}(-i)^l(1 - S_l)\exp\left(ikr\right), \quad (\text{якщо} \ \ kr \gg l). \end{gathered} \tag{12}$$

Коефіцієнт S_l, який у (12) визначає зміну хвиль, що поширюються від центра, залежить від енергії відносного руху і називається діагональним матричним елементом матриці розсіювання, який відповідає орбітальному квантовому числу l.

Амплітуда розсіювання $A(\theta)$ у формулі

$$\psi(r) \approx \varphi_a(r) + A(\theta)\frac{\exp ikr}{r} \quad (\text{якщо } kr \gg l)$$

виражається через матричні елементи матриці розсіювання у такий спосіб:

$$A(\theta) = \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1 - S_l)P_l(\zeta). \tag{13}$$

Матричні елементи S_l є комплексними величинами. При пружному розсіюванні матричні елементи матриці розсіювання можна виразити через дійсні зсуви фаз (або фази розсіювання) δ_l у такий спосіб:

$$S_l = \exp\left(i2\delta_l\right),$$

або

$$S_l - 1 = 2i \exp(i\delta_l) \sin \delta_l. \tag{14}$$

Оскільки, експоненціальні функції періодичні, то (14) визначає зсуви фаз неоднозначно. При вимозі $V \to 0$, $\delta_l \to 0$, зсуви фаз можуть лежати у інтервалі $(0, \pi)$, або $(-\pi/2, \pi/2)$.

Зокрема, у одновимірному випадку, якщо відбивання відбувається від непроникного потенціального бар'єру, то фаза відбитої хвилі змінюється на величину $\delta_l = \pi$.

Оскільки, для розсіювання вперед $\theta = 0$, $P_l(0) = 1$ то із (13) випливає, що

$$A(0) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - S_l). \tag{15}$$

Використовуючи вирази для $A(\theta)$ і S_l, можна через зсуви фаз виразити переріз пружного розсіювання

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\theta)| = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) P_l(\zeta) P_l'(\zeta) \sin(\delta_l)\ \sin(\delta_{l'})\ cos(\delta_l - \delta_{l'}).$$

Застосування методу парціальних хвиль є дуже зручним тоді, коли потенціал $V(r)$ є короткодіючим із радіусом дії R. У таких випадках у розсіюванні частинок малих енергій будуть брати участь парціальні хвилі лише із малим значенням квантового числа l. У цьому можна переконатися виходячи із таких якісних міркувань. На відстанях $r > R$ на частинку діє лише відцентрова сила відштовхування з енергією $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$. Тому частинки переважно рухатимуться на відстанях r які задовольнятимуть умову

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \ll \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E,$$

де E - енергія відносного руху. При відстанях $r < r_{0l}$, коли $r_{0l} = \sqrt{l(l+1)/k}$, імовірність виявлення частинки експоненціально мала. Якщо радіус дії потенціала R менший від r_{0l}, то відповідні парціальні хвилі не потрапляють у область, у якій діє $V(r)$ і не розсіюються. Тобто, хвилі з квантовим числом l, яке задовольняє умову

$$kR < \sqrt{l(l+1)}, \tag{16}$$

практично не розсіюються.

Зсув фаз δ_l визначає зміну фази асимптотичної радіальної хвильової функції під впливом центрально-симетричного потенціала $V(r)$. При відштовхуванні зсуви фаз – від'ємні. У борнівському наближенні зсуви фаз визначаються виразом

$$k\sin(\delta_l) \approx \frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^R V(r)r^2 j_l^2(kr)dr.$$

де R - радіус дії потенціала, а $j_l(kr)$ - сферична функція Бесселя. Борнівське наближення справедливе, якщо $|\sin(\delta_l)| \approx |\delta_l| \ll 1$.

Якщо енергія відносного руху така, що $kR \ll l$, то кажуть, що відбувається розсіювання повільних частинок. Із умови (16) слідує, що при зіткненні повільних частинок розсіюються лише s - хвилі (l=0), тобто відмінним від нуля є лише зсув фаз δ_0.

Дослідження розсіювання s - хвиль зводиться до розв'язку рівняння (9) при $l = 0$, тобто рівняння

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right) R_0(r) = 2mV(r)\hbar^{-2}R_0(r). \tag{17}$$

Щоб визначити зсув фаз δ_0 слід знайти розв'язок рівняння (17) і перетворити його до вигляду

$$R_0(r) = \exp(i\delta_0)\sin(kr + \delta_0),$$

який одержують із (12) при $S_0 = \exp(2i\delta_0)$.

2.2.1 Обґрунтування формули для амплітуди хвильової функції (15).

Функцію $\psi(r)$ з рівняння

$$\psi|_{r\to\infty} \approx \exp(ikz) + f(\vartheta)\frac{\exp(i\vec{k}\vec{r})}{r}, \tag{18}$$

яку також можна розкласти по повній системі сферичних функцій, на великих відстанях від початку координат можна звести до вигляду

$$\psi(r) \to \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} i^l P_l(\zeta) S_l \sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l),$$

де S_l і δ_l – довільні сталі. Але, оскільки хвильова функція повинна мати вигляд (18), тобто містити, крім плоскої хвилі, лише розбіжні сферичні хвилі, то коефіцієнти S_l у виразі

$$A(\theta)\frac{\exp(ikr)}{r} = \psi(r) - \exp(ikz) =$$
$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} i^l P_l(\zeta) \left[S_l \sin(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l) - \sin(kr - \frac{\pi}{2}l) \right]$$

повинні бути вибрані такими, щоб зникли збіжні хвилі $\exp(-ikr)$. З цієї вимоги випливає, що $S_l = \exp(i\delta_l)$ і ми одержуємо

$$A(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} P_l(\zeta) \left(\exp(2i\delta_l) - 1 \right).$$

2.2.2 Визначення залежності зсуву фаз від орбітального квантового числа l.

Для визначення залежності зсуву фаз від орбітального квантового числа l разом із рівнянням

$$\frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right] R_l(r) = 0, \text{ при } R_l(0) = 0$$

розглянемо рівняння, що відповідає вільному рухові частинки

$$\frac{d^2 R_l^{(0)}(r)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l^{(0)}(r) = 0, \quad \text{при } R_l^{(0)}(0) = 0.$$

Індекс $^{(0)}$ означає, що потенціал, у полі якого рухається частинка, рівний нулю. Домножимо перше рівняння на $R_l^{(0)}(r)$, а друге на $R_l(r)$, віднімемо від першого рівняння друге та проінтегрувавши результат від 0 до R. Одержимо

$$\int_0^R \left\{ R_l^{(0)}(r) \frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] \right\} R_l^{(0)}(r) R_l(r) dr -$$
$$\int_0^R \left\{ R_l(r) \frac{d^2 R_l^{(0)}(r)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \right\} R_l^{(0)}(r) R_l(r) dr,$$

або

$$\int_0^R \left\{ R_l^{(0)}(r) \frac{d^2 R_l(r)}{dr^2} - R_l(r) \frac{d^2 R_l^{(0)}(r)}{dr^2} \right\} dr = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^R V(r) R_l^{(0)}(r) R_l(r) dr.$$

Виконавши інтегрування частинами, у інтегралі зліва одержимо

$$\left[R_l^{(0)}(r) \frac{dR_l(r)}{dr} - R_l(r) \frac{dR_l^{(0)}(r)}{dr} \right] \Bigg|_0^R = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^R V(r) R_l^{(0)}(r) R_l(r) dr \qquad (19)$$

Оскільки асимптотичний розв'язок $R_l^{(0)}(r)$ при великих R має вигляд

$$R_l^{(0)}(r) = \sin(kr - \frac{\pi}{2} l) \ \text{ якщо } \ kr \gg l,$$

то можна шукати асимптотичний розв'язок для функції $R_l(r)$ у такому вигляді

$$R_l(r) = \sin(kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l).$$

Підставляючи ці асимптотичні розв'язки у рівняння (19), одержимо

$$k \ \sin \delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^R V(r) R_l^{(0)}(r) R_l(r) dr.$$

Порівняння формул

$$R_l^{(0)}(r) = \sin(kr - \frac{\pi}{2} l),$$

і

$$R_l(r) = \sin(kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l)$$

показує, що зсуви фаз δ_l визначають зміни фази асимптотичної радіальної хвильової функції під впливом центрально-симетричного потенціала $V(r)$. При відштовхуванні зсув фаз – від'ємний.

Якщо енергія відносного руху така, що $kR \ll l$, то кажуть що відбувається розсіювання повільних частинок. Із умов

$$kR \ll \sqrt{l(l+1)},$$
$$\sin \delta_l \approx -\frac{2m(kR)^{2l+1}}{\hbar^2 (1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1))^2} \int_0^R V(r) (\frac{r}{R})^{2l+1} r dr$$

випливає, що при розсіюванні повільних частинок розсіюються лише $s-$хвилі ($l = 0$), тобто відмінним від нуля є лише зсув фаз δ_0. У цьому випадку дослідження розсіювання зводиться до розв'язування рівняння

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right) R_0(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) R_0(r).$$

Для того, щоби знайти зсув фаз слід розв'язати це рівняння при великих r, перетворивши його до такого вигляду

$$R_0(r) = \exp(i\delta_0)\sin(kr + \delta_0),$$

який одержують із (12) $S_0 = \exp(i2\delta_0)$.

Диференціальний ефективний переріз розсіювання при $l = 0$ не залежить від кута розсіювання і рівний

$$d\sigma_0 = \frac{\sin^2\delta_0}{k^2} d\Omega.$$

Якщо у процесі розсіювання беруть участь хвилі із $l = 0$ та $l = 1$, то диференціальний переріз має вигляд

$$d\sigma = \frac{1}{k^2}\left[\sin^2\delta_0 + 6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_0 - \delta_1)\cos\theta + 9\sin^2\delta_1\cos^2\theta\right] d\Omega.$$

2.3 Приклад. Розсіювання на сферичній прямокутній потенціальній ямі

Розсіювання повільних частинок ($kR \ll l$) визначається рівнянням

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{2mV(r)}{\hbar^2}\right) R_0(r) = 0, \tag{20}$$

з граничною умовою

$$R_0(0) = 0 \tag{21}$$

та асимптотичною поведінкою при $r|_{\to\infty}$

$$R_0(r)|_{r\to\infty} = C\sin(kr + \delta_0). \tag{22}$$

Розсіювання відбувається на потенціалі

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{якщо } r \le R, \\ 0, & \text{якщо } r \ge R, \end{cases} \tag{23}$$

що відповідає притяганню.

Розв'язок (22) задовольняє рівняння (20) для всіх значень $r \geq R$. Всередині ями рівняння (20) набуває вигляду

$$\begin{aligned} &(\frac{d^2}{dr^2} + 2m\hbar^{-2}(E + V_0))R_0(r) = \\ &(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + 2m\hbar^{-2}V_0))R_0(r) = 0. \end{aligned} \tag{24}$$

Це рівняння є звичайним диференціальним рівнянням другого порядку із постійними коефіцієнтами. Його характеристичне рівняння має вигляд

$$k^2 + K^2 = 0.$$

Корені характеристичного рівняння - чисто уявні, тому його розв'язок можна записати у дійсній формі. Розв'язок рівняння (24), який задовольняє граничну умову (21), має вигляд

$$R_{01}(r) = C_1 \sin(Kr), \tag{25}$$

де $K^2 = k^2 + K_0^2 = (2m/\hbar^2)E + (2m/\hbar^2)V_0 \equiv k_i^2$.

Тобто $k_i^2 = k^2 + K_0^2$.

Оскільки, нас цікавить лише зсув фаз, то замість прирівнювання хвильових функцій та їх перших похідних достатньо прирівняти при $r = R$ їх логарифмічні похідні. Тоді

$$k \cot(kR + \delta_0) = K \cot(KR). \tag{26}$$

Введемо позначення

$$K \cot(KR) = D^{-1}$$

та використавши співвідношення

$$\cot(A + B) = \frac{1 - \tan A \ \tan B}{\tan A + \tan B},$$

для логарифмічної похідної при $r = R$ із (26) одержимо

$$k \cot(kR + \delta_0) = \frac{1 - \tan(kR) \tan \delta_0}{\tan(kR) + \tan \delta_0} = D^{-1}$$

$$\tan \delta_0 = \frac{kD - \tan(kR)}{1 + kD \tan(kR)}.$$

Зсув фаз δ_0, визначений цим співвідношенням, є неоднозначною функцією. Нас цікавитимуть лише головні значення, які знаходяться у інтервалі $(-\pi/2 \le \delta_0 \le \pi/2)$.

При енергіях, близьких до нуля, $\tan(kR) = kR + (kR)^3/3 + \cdots$ вираз для $\tan\delta_0$ набуває вигляду

$$\tan\delta_0 \approx \frac{k[D - R - (kR)^3/3R]}{1 + k^2 DR}.$$

За умови $kR \ll 1$ і $k^2 DR \ll 1$

$$\tan\delta_0 \approx k(D - R) = kr_0 \left(\frac{\tan(KR)}{KR} - 1 \right).$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2\delta_0 = 4\pi R^2 \left(1 - \frac{\tan(KR)}{KR} \right)^2.$$

Із останніх двох співвідношень випливає, що за виконання умови $\tan(KR) = KR$, зсув фаз і переріз розсіювання рівні нулю. Отже, для деяких глибини і ширини потенціальної ями розсіювання хвиль на такій ямі не відбувається.

Якщо рівність $\tan(KR) = KR$ не виконується і $KR \neq (2n+1)\pi/2,\ \ n = 0, 1, \cdots$, то при $k \to 0$ зсув фаз δ_0 прямує до нуля ($\delta_0 \to 0$), а ефективний переріз прямує до скінченої границі. Знак зсуву фаз δ_0 при малих енергіях визначається знаком рівності $\xi = \tan(KR) - KR$. При $KR < \pi/2$ ця різниця і δ_0 - додатні ($\delta_0 > 0$), а при $KR \to \pi/2$ переріз розсіювання прямує до нескінченності.

При розсіюванні повільних частинок на потенціальній ямі, у якій виконуються умови $K^2 = k^2 + K_0^2 \approx K_0^2$ і $KR = (2n+1)\pi/2$, переріз розсіювання досягає максимального значення, яке називають *резонансним*. Якщо взяти до уваги, що умова існування s-рівня із нульовою енергією у сферичній потенціальній ямі має вигляд $\cot(K_0 R) = 0$, то зрозуміло, що переріз розсіювання повільних частинок на сферичній потенціальній ямі досягає максимального значення у тому випадку, коли яма має s-рівень із нульовою енергією ($E = 0$). Якщо $KR = \pi/2$, то у ямі є один рівень із енергією $E = 0$, якщо $KR = 3\pi/2$, то у ямі є два s-рівні, один із яких відповідає енергії $E = 0$, якщо $KR = 5\pi/2$, то у ямі є три s-рівні, один із яких відповідає енергії $E = 0$ і т. д.

2.4 Розсіювання на потенціальній ямі довільної форми

Розв'язок рівняння

$$(\frac{d^2}{dr^2}+k^2-2mV(r)\hbar^{-2})R_0(r)=0, \tag{27}$$

при довільній потенціальній енергії $V(r)$ зручно реалізувати у імпульсному представленні. Через граничну умову $R_0(0)=0$ розклад $R_0(r)$ повинен містити лише синуси. Тобто

$$R_0(r)=\int_0^\infty R(q)\sin(qr)dq. \tag{28}$$

Підставляючи $R_0(r)$ у рівняння (27), одержуємо

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+k^2\right)\int_0^\infty R(q)\sin(qr)dq=\frac{2mV(r)}{\hbar^2}\int_0^\infty R(q)\sin(qr)dq.$$

Або

$$\int_0^\infty(-q^2+k^2)R(q)\sin(qr)dq=\frac{2mV(r)}{\hbar^2}\int_0^\infty R(q)\sin(qr)dq.$$

Домноживши це рівняння на $\sin(q'r)$ та проінтегрувавши його по dr, одержуємо

$$\int_0^\infty \sin(q'r)\left(\int_0^\infty(-q^2+k^2)R(q)\sin(qr)dq\right)dr=$$
$$\frac{2mV(r)}{\hbar^2}\int_0^\infty \sin(q'r)\left(\int_0^\infty R(q)\sin(qr)dq\right)dr.$$

Враховуючи рівність

$$\int_0^\infty \sin(qr)\sin(q'r)dr=\frac{\pi}{2}\delta(q-q')$$

приходимо до такого рівняння для s-розсіювання у імпульсному представленні

$$\left(q^2-k^2\right)R(q)=\int_0^\infty V(q,q')R(q')dq', \tag{29}$$

де

$$V(q,q') = -\frac{4m}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\sin(qr)dr. \qquad (30)$$

Рівняння (29) еквівалентне інтегральному рівнянню

$$R(q) = A\ \delta(q-k) + (q^2-k^2)\int_0^\infty V(q,q')R(q')dq', \qquad (31)$$

у якому доданок $A\ \delta(q-k)$ є розв'язком рівняння для вільного руху $(q^2-k^2)\delta(q-k) = 0$ і відповідає падаючій хвилі з енергією відносного руху $\hbar^2k^2/2m$. Нас цікавлять розв'язки цього рівняння, які у координатному представленні мають такий асимптотичний вигляд $R_0(r)|_{r\to\infty} = C\sin(kr+\delta_0)$ (22), тобто

$$R_0(q) = C\sin(kr+\delta_0) = C\cos\delta_0(\sin(kr)+\tan\delta_0\cos(kr)). \qquad (32)$$

Щоб знайти такий розв'язок, перетворимо (31) до координатного предсталення, підставивши (32) у (28) та виконавши інтегрування. Тоді

$$R(r) = A\sin(kr) + \int_0^\infty \frac{B(q)}{q^2-k^2}dq, \qquad (33)$$

де

$$B(q) = \int V(q,q')\ R(q')dq'$$

є регулярною функцією від q.

Константа A і правило обходу полюса $q=k$ при обчисленні інтеграла у (33) визначають з умови переходу функції (33) у (32) при $r\to\infty$. Зазначимо, що розсіяна хвиля у (32) відповідає стоячій хвилі, а не хвилі, що поширюється від центра, як це мало місце у (12). Для одержання асимптотичного виразу функції (33), інтеграл у (32) слід обчислити у сенсі головного значення. Виділення сингулярної частини у інтегралі (33), здійснимо розклавши вираз $1/(q^2-k^2)$ на прості дроби, тобто

$$\frac{1}{q^2-k^2} = \frac{1}{2q}\left(\frac{1}{q-k}+\frac{1}{q+k}\right).$$

Другий доданок у цьому виразі є регулярною функцією, а тому його внесок у інтеграл за умови $r\to\infty$, буде нульовим, з тієї ж причини можна відсунути і нижню межу інтегрування до $-\infty$. Отже

$$\int \frac{B(q)\sin(qr)}{q^2-k^2}dq \approx \frac{B(k)}{2k}\int\frac{\sin(qr)}{q-k}dq, \text{ при } (r\to\infty).$$

Виконавши заміну змінних $q - k = x$ та позначивши головне значення інтеграла символом, P одержимо

$$P \int \frac{\sin(qr)}{q-k} dq = \int \frac{\sin((k+x)r)}{x} dx =$$
$$\sin(kr)\ P \int \frac{\cos(xr)}{x} dx + \cos(kr)\ P \int \frac{\sin(xr)}{x} dx.$$

Враховуючи, що

$$P \int \frac{\sin(xr)}{x} dx = \pi, \quad P \int \frac{\cos(xr)}{x} dx = 0,$$

остаточно знаходимо

$$R(r) = A \sin(kr) + \frac{\pi B(k)}{2k} \cos(kr) \text{ при } (r \to \infty). \tag{34}$$

Порівнюючи цей вираз із (32) одержуємо

$$\begin{aligned} A =& C \ \cos \delta_0, \\ \frac{\pi B(k)}{2k} =& C \sin \delta_0, \\ \tan \delta_0 =& \frac{\pi B(k)}{2kA} = \frac{\pi}{2kA} \int V(k, q') R(q') dq'. \end{aligned} \tag{35}$$

Якщо відомий розв'язок інтегрального рівняння (31), то, підставляючи його у (35), можна знайти зсув фаз δ_0. Зокрема, якщо справедливе борнівське наближення, то у (35) слід підставити $R(q) = A\ \delta(q-k)$. У цьому випадку одержуємо

$$\tan \delta_0^(B) = \frac{\pi V(k, k^{'})}{2k} = - - \frac{2m}{k\hbar^2} \int_0^\infty V(r) \sin^2(kr) dr.$$

Розв'язування рівняння (31) ускладнює застосування формули (35) для обчислення зсуву фаз. Тому, часто застосовують непрямі методи, які дають змогу виразити зсув фаз δ_0 через величини, які можна визначити із результатів експеримернту. Якщо ввести позначення

$$f(k) = \left[\frac{1}{R_0} \frac{dR_0}{dr} \right]_{r=R} = k \ \cot(kR + \delta_0)$$

для логарифмічної похідної від радіальної хвильової функції поза областю дії сил, то зсув фаз можна виразити безпосередньо через $f(k)$

$$\delta_0 = \arctan\left[\frac{k}{f(k)}\right] - kR, \text{ при } (kR \ll 1). \tag{36}$$

У випадку прямокутної потенціальної ями $f(k) = D^{-1}$ ця формула переходить у $\delta_0 = \arctan(kD) - kR$. У загальному випадку для обчислення δ_0 слід знати хвильову функцію у області дії сил. Із (36) видно, що якщо логарифмічна похідна $f(k)$ при деяких значеннях k_0 дорівнює нулю, то зсув фаз $|\delta_0| = \pi/2$ і переріз s-розсіювання набуває максимального значення

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k_0^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi}{k_0^2}.$$

Тому енергію $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$, яка відповідає значенню $k = k_0$, називають резонансною енергією і кажуть, що потенціальна яма має віртуальний рівень енергії E_0.

Для обчислення логарифмічної похідної $f(k)$ треба знати розв'язок рівняння Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) - E\right) R_0(r) = 0 \tag{37}$$

для s - станів у області дії сил ($r \leq R$). Якщо енергія $E \ll |\overline{V(r)}|$ і в потенціальній ямі $V(r)$ є дискретний s-рівень із від'ємною енергією $-\varepsilon$ при $\varepsilon \leq |\overline{V(r)}|$, то $R_0(r)$ не буде суттєво відрізнятися від розв'язку рівняння

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \varepsilon\right) R'(r) = 0. \tag{38}$$

При $r \geq R$ рівняння (38) переходить у рівняння

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon\right) R''(r) = 0. \tag{39}$$

Розв'язок цього рівняння, який відповідає зв'язаному станові має вигляд

$$R''(r) = A\exp\left(-\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}r\right).$$

Отже, при $r = R$ повинна виконуватися рівність

$$\left[\frac{1}{R}\frac{dR'}{dr}\right]_{r=R} = \left[\frac{1}{R}\frac{dR''}{dr}\right]_{r=R} = -\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}.$$

Оскільки, при $r \leq R$, $R' \approx R_0$, то можна прийняти, що

$$f(k) \approx -\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}.$$

Отже, при ε і E значно менших від $|\overline{V}|$, логарифмічна похідна визначається через енергію зв'язаного s-стану. Використавши знайдений вираз для $f(k)$ одержуємо

$$\sigma_0 \approx 4\pi \left[k^2 + \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right]^{-1} = \frac{2\pi\hbar^2}{m(E+\varepsilon)}.$$

Цей ефективний переріз розсіювання набуває максимального значення при енергії відносного руху $E = 0$. Це максимальне значення є тим більшим чим меншим є ε. При $\varepsilon = 0$ настає "істинний" резонанс.

2.5 Теорія непружного розсіювання частинок

Тепер розглянемо процеси, які можуть відбуватися при непружному розсіюванні. Непружними називають такі процеси, при яких змінюються внутрішні стани частинок. Непружними будуть, зокрема, зіткнення, при яких відбувається перехід частинки у збуджений стан, утворення нових частинок та ін. Кожен із можливих процесів називають відповідним каналом реакції. Розглянемо процеси, у яких існують пружні і непружні канали реакції. На початку узагальнимо фазову теорію розсіювання таким чином, щоб в один спосіб можна було описати, як пружні, так і непружні процеси розсіювання. Для формалізації опису процесів розсіювання вважатимемо, що розсіюючий центр знаходиться у центрі уявної сфери великого радіуса R_0.

Якщо в центрі сфери нема розсіюючого центра, то радіальну функцію l-ої хвилі можна записати у вигляді суперпозиції двох хвиль

$$R_l(r) = a_l \frac{e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})}}{2ikr} - a_l \frac{e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})}}{2ikr} = a_l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr}. \tag{40}$$

У цьому виразі перший доданок описує розбіжну хвилю, а другий - збіжну, причому наведені вирази асимптотичні, оскільки, за припущенням R_0 – велике. Амплітуди і фази обох хвиль однакові, а хвильову функцію $R_l(r)$ можна записати як добуток дійсної функції на деяку сталу. Тому потік через замкнуту сферичну поверхню – нульовий

$$j_l = \frac{\hbar}{2mi} \int \left(\psi_l^* \frac{\partial \psi_l}{\partial r} - \psi_l^{\frac{\partial \psi_l^*}{\partial r}} \right) r^2 d\Omega = 0, \tag{41}$$

де $\psi_l = R_l(r) P_l(\cos(\theta)$.

Якщо в центрі сфери – розсіюючий центр, на якому частинка може зазнавати виключно пружного розсіювання, то радіальну функцію l-ої хвилі можна записати у вигляді

$$R_l(r) = F_l \frac{e^{2i\delta_l} e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})}}{2ikr} = B_l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{kr}. \tag{42}$$

У цьому випадку амплітуда збіжної і розбіжної хвиль відрізняються на множник $e^{2i\delta_l}$. У цьому випадку повний потік через поверхню сфери також рівний нулю. Той факт, що збіжна і розбіжна хвилі мають різні коефіцієнти , цьому не протирічить, оскільки $|e^{2i\delta_l}|^2 = 1$.

Якщо в центрі сфери – розсіюючий центр, на якому частинка може зазнавати непружного розсіювання, записати радіальну функцію, враховуючи всі можливі непружні процеси – неможливо. Проте можна спростити задачу, розглядаючи окремо пружне розсіювання і можливі види непружного розсіювання.

Радіальну частину хвильової функції l-ої парціальної хвилі, яка описує пружне розсіювання частинки, формально можна записати у вигляді

$$R_l(r) = b_l \frac{S_l e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})}}{2ikr}. \tag{43}$$

Цей вираз записаний подібно до (42), але він враховує той факт, що поряд із пружним розсіюванням можливе також і непружне. Коефіцієнт S_l за модулем менший від одиниці. Це вказує на те, що при наявності непружного розсіювання збіжний потік частинок, які зазнали пружного розсіювання, переважає розбіжний. При цьому хвильова функція має вигляд

$$\psi = \sum_l b_l \frac{S_l e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})}}{2ikr} P_l(\cos\theta) = \sum_l \psi_l. \tag{44}$$

Коефіцієнти b_l визначені із умови, що хвильова функція ψ співпадає із (1). Провівши відповідні обчислення, подібні до тих, що були здійснені для випадку пружного розсіювання, одержуємо

$$\psi = \sum_{l}^{\infty} \frac{i^l}{2ikr}(2l+1)\left[S_l e^{i(kr-\frac{\pi l}{2})} - e^{-i(kr-\frac{\pi l}{2})}\right] P_l(\cos\theta). \tag{45}$$

Підставивши у вираз для потоку (41) хвильову функцію ψ_l та її похідну $\partial\psi_l/\partial l$ можна показати, що потік пружно розсіяних частинок через сферу радіусом $r \gg R_0$ – відмінний від нуля і рівний

$$j_l = -\frac{\pi\hbar}{mk}(2l+1)(1-|S_l|^2). \tag{46}$$

Оскільки $|S_l| < 1$, то потік – від'ємний, тобто результуючий потік спрямований всередину сфери. Цей результат спричинений тим, що деякі частинки зазнають непружних розсіювань, а тому інтенсивність пружно розсіяних частинок з моментом l – менший від інтенсивності падаючих частинок, а отже результуючий потік – від'ємний. Оскільки, густина потоку падаючих частинок рівна v, то для l-го парціального ефективного перерізу непружного розсіювання маємо

$$\sigma_{l\ nonelast} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)(1-|S_l|^2). \tag{47}$$

Амплітуда ж пружного розсіювання має вигляд

$$A(\theta) = \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos(\theta)), \tag{48}$$

у якій $e^{2i\delta_l}$ замінили на S_l.

Сукупність комплексних величин S_l визначає ефективний переріз як пружного так і непружного розсіювання. У частинному випадку пружного розсіювання $S_l = e^{2i\delta_l}$.

Зазначимо, що ввівши комплексний потенціал $U = V_1 - iV_2$, у якому V_1 і V_2 – дійсні величини, можна описати і поглинання частинок. Саме уявна частина комплексного потенціала характеризує поглинання чи випромінювання частинок. Справді, рівняння Шредингера для цього випадку має вигляд

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V_1 - iV_2\right)\psi.$$

У цьому випадку для рівняння неперервності, одержуємо вираз

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\mathbf{j} - \frac{2V_2\psi\psi^*}{\hbar} = 0,$$

у якому вирази для ρ і $\mathbf{j}$ мають звичну форму

$$\rho = \psi^*\psi,$$
$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}[\psi grad(\psi^*) - \psi^* grad(\psi)].$$

У стаціонарному випадку, при $V_2 = 0$, $div\mathbf{j} = 0$, що відповідає відсутності поглинання чи випромінювання частинок. При $V_2 \neq 0$

$$div\mathbf{j} = \frac{2V_2\rho}{\hbar}.$$

2.6 Матриця розсіювання

Викладений підхід до проблеми розсіювання пов'язаний із заданням явного вигляду потенціала у всьому просторі. Разом з тим, існує загальніший варіант теорії розсіювання, який пов'язаний із оператором еволюції квантово-механічної системи. Цей підхід полягає у тому, що якщо задана хвильова функція системи частинок $\psi_a(t \to -\infty)$ у початковому стані, тобто до взаємодії, то хвильову функцію системи після взаємодії $\psi(t \to \infty)$ можна виразити через $\psi_a(t \to -\infty)$ за допомогою оператора еволюції $\hat{V}(t, t_0)$.

$$\psi(x, t) = \hat{V}(t, t_0)\psi(x, t_0).$$

Якщо цей вираз підставити у рівняння Шредингера, то приходимо до рівняння для оператора $\hat{V}(t, t_0)$

$$i\hbar\frac{\partial\hat{V}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{V}(t),$$

за умови $\hat{V(0)} = 1$. Якщо оператор $\hat{V}(t, t_0)$ явно від часу не залежить, то розв'язок цього рівняння формально можна записати у вигляді

$$\hat{V}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t},$$

у якому експоненту слід розуміти, як розклад у степеневий ряд.

Матрицею розсіювання називають граничний вираз для оператора еволюції

$$\hat{S} = \lim \Big|_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to \infty}} \hat{V}(t, t_0). \tag{49}$$

Матриця розсіювання $\hat{S}$ перетворює початковий стан $\psi_a(t \to -\infty)$ у кінцевий стан $\psi(t \to \infty)$

$$\psi(\infty) = \hat{S}\psi_a(-\infty). \tag{50}$$

Індексом a біля хвильової функції позначено повний набір квантових чисел, які задають стан системи до розсіювання.

Розкладемо хвильову функцію ψ у ряд по деякій повній системі функцій ψ_b, у якій b позначає відповідний набір квантових чисел

$$\psi = \sum_b c_b \psi_b. \tag{51}$$

Коефіцієнти c_b, як слідує із (50), виражаються через матричні елементи оператора $\hat{S}$

$$c_b = (\psi_b, \psi) = (\psi_b, \hat{S}\psi_a) = \langle b|S|a\rangle = S_{ba}. \tag{52}$$

Квадрат модуля амплітуди c_b дає повну імовірність переходу системи із стану a у стан b

$$W'_{ba} = |S_{ba}|^2. \tag{53}$$

Отже, матричні елементи оператора $\hat{S}$ пов'язані безпосередньо із відповідними імовірностями переходів.

Оскільки, оператор $\hat{V}(t, t_0)$ – унітарний, то його граничний випадок $\hat{S}$ також є унітарним, тобто

$$\hat{S}\hat{S^+} = \hat{S^+}\hat{S} = \hat{I}, \tag{54}$$

де $\hat{I}$ – одиничний оператор. Із останнього виразу можна одержати очевидний результат

$$\sum_b S^+_{ab} S_{ba} = \sum_b |S_{ba}|^2 = 1, \tag{55}$$

який показує, що сума імовірностей усіх можливих переходів дорівнює одиниці. Виходячи із співвідношення (53), ефективний переріз можна виразити через матричні елементи оператора $\hat{S}$.

Припустимо, що початковий стан ψ_a характеризується певним значенням енергії E_a. Оскільки, повна енергія системи зберігається, то матричні елементи S_{ab} можна записати у вигляді

$$S_{ba} = S^E_{ba}\ \delta(E_a - E_b). \tag{56}$$

Прийнято говорити, що матриця S^E_{ab} задана на енергетичній поверхні. Через неї повна імовірність переходу (53) задається у такий спосіб

$$W'_{ta} = |S^E_{ba}|^2 \delta^2(E_a - E_b). \tag{57}$$

Відповідно, імовірність переходу за одиницю часу визначається як

$$W = \frac{1}{2\pi\hbar}|S^E_{ba}|^2. \tag{58}$$

Щоб знайти переріз процесу, треба поділити імовірність переходу на густину потоку падаючих частинок. Після деяких обчислень можна одержати такий вираз для ефективного перерізу процесу $a \to b$

$$\sigma_{ba} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_l (2l+1)|S^l_{ba} - \delta_{ba}|^2. \tag{59}$$

Звідси, для пружного розсіювання

$$\sigma_{aa} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_l (2l+1)|S^l_{aa} - 1|^2. \tag{60}$$

А для повного перерізу всіх непружних процесів, який одержують підсумовуванням перерізів σ_{ba} по всіх каналах $b \neq a$, матимемо

$$\sigma_{nonelast} = \sum_{b\neq a}\sigma_{ba} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_{b\neq a}\sum_l (2l+1)|S^l_{ba}|^2. \tag{61}$$

Застосовуючи умову унітарності S-матриці у вигляді

$$\sum_{b\neq a}|\sigma^l_{ba}|^2 = 1 - |S^l_{aa}|^2,$$

для перерізу непружного розсіювання одержимо

$$\sigma_{nonelast} = \frac{\pi}{k_a^2}\sum_l (2l+1)(1 - |S^l_{aa}|^2). \tag{62}$$

Формули (60) і (62) співпадають із відповідними виразами фазової теорії розсіювання. Порівняння відповідних виразів показує, що введені величини S_l є діагональними елементами матриці розсіювання $\hat{S}$. Якщо непружні процеси – відсутні, то $S^l_{ba} = 0$ при $b \neq a$ і $|S^l_{aa}|^2 = 1$, а

$$S^l_{aa} = e^{2i\delta_l}.$$

2.7 Матриця розсіювання і теорія збурень

Іноді задачу теорії розсіювання вдається розв'язати методами теорії збурень. Зокрема, якщо гамільтоніан системи можна представити у вигляді суми

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}',$$

де $\hat{H}_0$ – гамільтоніан системи невзаємодіючих частинок, а $\hat{H}'$ – описує їх взаємодію, то для відшукання явного вигляду S-матриці зручно використати представлення взаємодії. Хвильова функція у цьому представленні визначається рівнянням

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}' \varphi(x,t). \tag{63}$$

Оператор $\hat{V}(t, t_0)$, який задається формулою

$$\psi(x,t) = \hat{V}(t)\varphi(x,0),$$

і за означенням перетворює хвильову функцію, задану у момент часу t_0 у хвильову функцію, визначену у момент часу t, можна записати у представленні взаємодії, а саме

$$\varphi(t) = \hat{V}(t, t_0)\varphi(t_0). \tag{64}$$

Підставляючи (64) у (63), одержуємо

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{V}(t,t_0)}{\partial t} &= \hat{H^{'}_{int}} \hat{V}(t,t_0), \\ \hat{V}(t_0,t_0) &= 0. \end{aligned} \tag{65}$$

Ця система рівнянь еквівалентна інтегральному рівнянню

$$\hat{V}(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt^{'} \hat{H}_{int}(t^{'}) \hat{V}(t^{'}, t_0). \tag{66}$$

Отримане інтегральне рівняння можна розв'язати методом послідовних наближень

$$\hat{V}(t,-\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt_1 \hat{H}_{int}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{t} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \hat{H}_{int}(t_1)\hat{H}_{int}(t_2) + ... + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{t} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 ... \int_{-\infty}^{n-1} \hat{H}_{int}(t_1)\hat{H}_{int}(t_2)...\hat{H}_{int}(t_n) dt_n + ... \ . \tag{67}$$

Зазначимо, що області інтегрування за змінними $t_1, t_2, ...t_n$ повинні бути упорядковані як $t_1 > t_2 > ... > t_n$. Одержану формулу називають формулою Дайсона і вона дає змогу пов'язати S-матрицю із енергією взаємодії. Дана формула вважається точною, якщо у ній виконано підсумовування усього ряду теорії збурень.

2.8 Аналітичні властивості матриці розсіювання

Як вже було зазначено, апарат матриці розсіювання дає змогу одержати важливі результати теорії розсіювання, які не пов'язані з конкретним виглядом потенціала. Зокрема, одержання таких результатів пов'язане із вивченням аналітичних властивостей S-матриці. Для спрощення викладок обмежимося випадком пружного розсіювання. У такому разі елементи S-матриці задаються виразом $S^l_{aa} = e^{2i\delta_l}$.

Асимптотичний вираз у точці $r = 0$ для хвильової функції частинки, що рухається у полі, потенціал якого спадає на великих відстанях швидше, аніж $1/r$, і енергія якої $E = \hbar^2 k^2/2m$ та моментом l, має вигляд

$$\chi_{kl}(r) = rR_{kl}(r) = a_l(k)e^{i(kr-\frac{\pi l}{2})} + b_l(k)e^{-i(kr-\frac{\pi l}{2})}. \tag{68}$$

Порівнюючи цей вираз із формулою (12) та враховуючи $S^l_{aa} = e^{2i\delta_l}$ матричні елементи $S^l_{aa} \equiv S_l$ записуються через постійні $a_l(k)$ і $b_l(k)$

$$S_l(k) = -\frac{a_l(k)}{b_l(k)}. \tag{69}$$

Вважатимемо, що хвильова функція χ_{kl}, а відповідно і $S_l(k)$ – функції комплексної змінної k. У цьому випадку можна показати, що функцію комплексної змінної досить розглянути лише у одному квадранті, а не на усій комплексній площині k. Оскільки, рівняння Шредингера не змінюється при заміні k на $-k$, то функція χ_{-kl} описуватиме той же стан, що і χ_{kl}. Тобто, обидві функції можуть відрізнятися лише на довільну сталу. Зробивши у (68) заміну k на $-k$, знаходимо

$$\frac{a_l(k)}{b_l(k)} = \frac{b_l(-k)}{a_l(-k)},$$

звідки випливає, що

$$S_l(k) = S_l^{-1}(-k). \tag{70}$$

Оскільки χ_{kl}^* з точністю до деякої сталої також співпадає із χ_{kl},

$$S_l(k) = \left(S_l^{-1}(-k)\right)^{-1}. \tag{71}$$

Останнє співвідношення записане для дійсних k. Здійснивши аналітичне продовження у комплексну площину k, одержуємо

$$S_l(k) = \left(S_l^*(k^*)\right)^{-1}. \tag{72}$$

Два останні співвідношення пов'язують між собою значення функції $S_l(k)$ у одному із квадрантів площини комплексної змінної k із її значеннями у відповідних точках інших трьох квадрантів. Із співвідношення (71) слідує, що при дійсному k має місце співвідношення $|S_l(k)|^2 = 1$, а отже фаза δ_l у виразі $S_l = e^{2i\delta_l}$ – дійсна. На уявній осі, як видно із (71) і (70), функція $S_l(k)$ – дійсна, а отже фаза δ_l – уявна.

Розглянемо розміщення особливостей функції $S_l(k)$. Нехай потенціалу $V(x)$ відповідає зв'язаний стан частинки із енергією E_0. Цей зв'язаний стан описується хвильовою функцією $\chi_{k_0 l}$, що є регулярною у нулі та на великих відстанях затухає як $e^{-|k_0|r}$, де $k_0 = i\sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$. Отже, хвильова функція χ_{kl}, якщо її аналітично продовжити у комплексну площину, повинна затухати при $k = k_0$ як $e^{-|k_0|r}$. Тому у точці $k = k_0$ повинна виконуватися умова $b_l(k_0) = 0$, а відповідно, згідно із (69), функція $S_l(k)$ у точці $k = k_0$ має полюс. У симетричній точці, яка знаходиться у нижній півплощині, тобто у точці $k = -k_0$, функція $S_l(k)$, як це слідує із (70), має нуль. Отже, ми прийшли до висновку, що кожному зв'язаному станові відповідає полюс функції $S_l(k)$, що знаходиться у певній точці верхньої уявної осі комплексної площини змінної k. Зазначимо, що на уявній півосі можуть виникати також і "фальшиві" полюси, які не відповідають зв'язаним станам. Можна показати, що "фальшиві" полюси не виникають при введенні радіуса обрізання R, який відповідає умові $V(r) = 0$ при $r > R$. При цьому радіус обрізання може бути як завгодно великим.

Зауважимо також, що функція $S_l(k)$ не може мати полюсів у верхній півплощині поза уявною піввіссю, оскільки у цьому випадку такому полюсу відповідало б комплексне значення енергії зв'язаного стану.

Функція $S_l(k)$ може мати полюси і у нижній півплощині, і вони можуть розміщатися і не на уявній напівосі. Як видно із (70) і (72), ці полюси повинні бути розміщені парами, симетрично відносно уявної півосі. У верхній півплощині таким полюсам відповідають нулі функції $S_l(k)$. Полюсам, розміщеним у нижній півплощині відповідає хвильова функція, яка експоненціально зростає на великих відстанях, тому вона не може описувати зв'язані стани. Цим полюсам, які знаходяться у нижній півплощині відповідають квазістаціонарні стани, які розпадаються протягом деякого скінченого часу.

Шукатимемо полюс функції $S_l(k)$ для полюса, якому відповідає зв'язаний стан, енергія якого $E = -E_0$, а $k = k_0 = i\sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$. Позначивши лишок $S_l(k)$ як c_l, визначимо функцію $S_l(k)$ у околі точки $k = k_0$ у вигляді

$$S_l = \frac{c_l}{k - k_0}. \tag{73}$$

Величина c_l пов'язана із амплітудою хвильової функції стаціонарного стану з енергією $E = -E_0$. Щоб виявити цей зв'язок, запишемо рівняння для нормованої на одиницю функції χ_{kl} та її похідної по енергії E

$$\chi_{kl}'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U - \frac{\hbar^2\ l(l+1)}{2mr^2}\right)\chi_{kl} = 0,$$

$$\left(\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E}\right)'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U - \frac{\hbar^2\ l(l+1)}{2mr^2}\right)\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E} = \frac{2m}{\hbar^2}\chi_{kl}.$$

Домноживши перше із рівнянь на $\partial\chi_{kl}/\partial E$, а друге на χ_{kl} і віднімемо їх одне від одного. Проінтегрувавши результат по dr, маємо

$$\chi_{kl}'\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E} - \chi_{kl}\left(\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E}\right)' = \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^r \chi_{kl}^2 dr. \tag{74}$$

Скористаємося цим співвідношенням за умови, що $E = -E_0$ і $r \to \infty$. І якщо функції $a_l(k)$ і $b_l(k)$ у околі точки $k = k_0$ розкласти у ряд та перепозначити постійні

$$a_l(k) = a_l(k_0) = A_l i^{-l}, \quad b_l(k) = \beta_l(k - k_0), \tag{75}$$

то використавши (68) та (74), одержимо

$$\beta_l = -\frac{1}{a_l} = -\frac{i^{l+1}}{A_l}. \tag{76}$$

Підставивши одержаний вираз у (69), матимемо лишок у точці $k = k_0$

$$c_l = iA_l^2(-1)^{l+1}. \tag{77}$$

Отже, нам вдалося пов'язати величину лишка c_l із амплітудою A_l у асимптотичному виразі для хвильової функції $\chi_{kl} = A_l e^{-|k_0|r}$ зв'язаного стану.

Дослідження поведінки фаз розсіювання δ_l, а, отже, і функції $S_l = e^{2i\delta_l(k)}$ та екстраполяція цих результатів у комплексну площину дає змогу із (77) зробити певні висновки стосовно хвильової функції зв'язаного стану.

Аналітичні властивості величин $S_l(k)$ також дають змогу одержати важливі співвідношення, яким повинна задовольняти амплітуда розсіювання. Ці співвідношення називають дисперсійними співвідношеннями.

3 Теорія розсіювання для одновимірного випадку

Тепер розглянемо квантовомеханічну теорію розсіювання для одновимірного випадку. У одновимірному випадку теорія розсіювання – простіша, тому що на відміну від тривимірного випадку, у якому існує континуум кутів розсіювання, у одновимірному випадку існує лише два напрямки розсіювання: напрям "вперед" і напрям "назад". Гамільтоніан у одновимірному випадку є лише двократно виродженим, а не нескінчено виродженим, як у тривимірному випадку. Тому одновимірне розсіювання для кожної заданої енергії можна описати за допомогою двовимірного векторного простору, а не нескінченновимірного, як у випадку тривимірного розсіювання. S-матриця у цьому випадку є матрицею другого порядку, а не нескінченного порядку. Це спрощує трактування багатьох фізичних процесів теорії розсіювання та дає змогу проілюструвати багато моментів тривимірної теорії розсіювання. Зокрема, у тривимірній теорії розсіювання розглядають центральносиметричні потенціали, тобто потенціали, які не змінюються при поворотах. Натомість у одновимірній теорії розсіювання можна використати симетрію потенціла відносно інверсії щодо початку координат, якщо він симетричний відносно відбивань. Ця властивість симетрії дає змогу розділити задачу розв'язування рівняння Шредінгера на дві задачі для двох незалежних парціальних хвиль.

Гамільтоніан вільної частинки масою m, імпульс якої рівний $p = \hbar k$, має вигляд

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}. \tag{78}$$

Імпульс p комутує із гамільтоніаном H_0, а отже їх можна одночасно діагоналізувати. Їх власні функції будуть плоскими хвилями. Тобто

$$\begin{aligned} p\ \psi_k(x) =& \hbar k\ \psi_k(x), \\ H_0\psi_k(x) =& \frac{(\hbar k)^2}{2m}\psi_k(x). \end{aligned} \tag{79}$$

Енергетичний спектр вільної частинки двократно вироджений, оскільки його власні значення залежать від абсолютного значення k, і не залежать від його знака. Будь-яка лінійна комбінація функцій ψ_k і ψ_{-k} також буде їх власною функцією, тобто завжди можна побудувати власну функцію

$$\Psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx). \tag{80}$$

Власну функцію (80) можна також представити у вигляді

$$\Psi(x) = \sin(kx + \delta). \tag{81}$$

У цих формулах A, B і δ - деякі сталі.

Власні функції оператора імпульсу описують біжучі хвилі. Хвильова функція (80) є лінійною комбінацією двох біжучих хвиль, що поширюються у протилежних напрямках. Хвильова функція (81) описує стоячу хвилю.

Гамільтоніан (78) інваріантний відносно інверсії щодо початку координат, тому оператор парності P комутує з ним, а отже гамільтоніан має спільну із оператором парності систему власних функцій. Парні і непарні власні функції оператора парності мають такий вигляд

$$\begin{aligned} \psi_{k0}(x) &= \cos(kx), \\ \psi_{k1}(x) &= \sin(kx), \end{aligned} \tag{82}$$

причому

$$
\begin{aligned}
P\psi_{k0}(x) &= \psi_{k0}(x), \\
P\psi_{k1}(x) &= -\psi_{k1}(x).
\end{aligned}
\tag{83}
$$

Якщо до гамільтоніана вільної частинки додати потенціал $V(x)$, який відмінний від нуля у скінченій області, що обмежена значеннями $|x| = X$, то одержимо

$$
H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x), \tag{84}
$$

причому $V(x) = 0$ при $|x| > X$. Спектр власних значень при $E \geq 0$ не зміниться при додаванні потенціала $V(x)$ у тому сенсі, що він залишиться неперервним і двократно виродженим. Крім того, вигляд власних функцій не зміниться при $E \geq 0$ у області, не зайнятій потенціалом. Завжди можна знайти власні функції, що матимуть поведінку таку ж, як і будь-яка із власних функцій (80, 81, 82) як при $x > X$, так і при $x < -X$. Наперед невідомо, як пов'язані між собою ці функції у від'ємній і додатній області. Можливо, хвильова функція яка при $x > X$ має вигляд $\psi_k(x) = \exp(ikx)$, повинна бути лінійною комбінацією функцій (80) при $x < -X$, а те, якою буде ця комбінація, визначається формою потенціала $V(x)$.

Як приклад, розглянемо хвильову функцію $\psi^{(+)}(x)$, яка при $x > X$ має вигляд плоскої хвилі

$$
\psi^{(+)}(x) = S\ \exp(ikx) \quad \text{при } x > X, \tag{85}
$$

з деяким коефіцієнтом S. При $x < -X$ власна функція має вигляд

$$
\Psi(x) = \exp(ikx) + R\exp(-ikx) \quad \text{при } x < -X \tag{86}
$$

із деяким коефіцієнтом R. Нормування власної функції (86) вибирають таким, щоб коефіцієнт при першому доданку був рівним одиниці. Розглянуті власні функції мають такий фізичний зміст. При $x < -X$ існує дві біжучі хвилі, які поширюються у протилежних напрямках, а при $x > X$ існує лише одна хвиля, яка поширюється вправо. Перший доданок у другій формулі можна трактувати, як хвилю що падає, другий доданок – як хвилю, що відбилася, а першу формулу – як хвилю, що пройшла. Коефіцієнти R і S – амплітуди хвиль, які відбилися і пройшли для даного потенціала. Їх можна знайти із розв'язку рівняння Шредингера на всій осі, включно із областю, у якій діє потенціал $V(x)$.

3.1 Зв'язок симетрії відносно відбивань і поворотів із зсувом фаз

Якщо потенціал $V(x)$ інваріантний відносно відбивання, тобто

$$V(x) = V(-x), \ i \ \ [P, V] = 0,$$

тоді гамільтоніан (84) і оператор парності P можна одночасно діагоналізувати, що дає змогу побудувати парні і непарні розв'язки, які будуть стоячими хвилями, та які зручно записати у такому вигляді

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \cos(kx + \delta_0) \text{ при } x > X, \ \ \psi_0(x) = \cos(kx - \delta_0) \text{ при } x < -X, \\ \psi_1(x) &= \cos(kx + \delta_1) \text{ при } x > X, \ \ \psi_1(x) = \cos(kx - \delta_1) \text{ при } x < -X. \end{aligned} \tag{87}$$

Ці стани відрізняються від відповідних власних станів (82) зсувом фаз δ_0 і δ_1. Величина цих зсувів визначається виглядом потенціала $V(x)$. Їх можна знайти, роз'язавши рівняння Шредингера.

Можна побудувати лінійні комбінації власних станів визначеної парності при $x > X$

$$\begin{aligned} &\psi^+(x) = \ e^{+i\delta_0}\psi_0(x) + ie^{+i\delta_1}\psi_0(x) = e^{+i\delta_0}\cos(kx + \delta_0) + ie^{+i\delta_1}\sin(kx + \delta_1) = \\ &\frac{e^{+i\delta_0}}{2}\left(e^{i(kx+\delta_0)} + e^{-i(kx+\delta_0)}\right) + \frac{e^{+i\delta_1}}{2}\left(e^{i(kx+\delta_1)} - e^{-i(kx+\delta_1)}\right) = \\ &\frac{1}{2}\left(e^{i(kx+2\delta_0)} + e^{-ikx} + e^{i(kx+2\delta_1)} - e^{-ikx}\right) = \frac{1}{2}\left(e^{+2i\delta_0} + e^{+2i\delta_1}\right)e^{ikx} \text{ при } x > X, \end{aligned} \tag{88}$$

та

$$\begin{aligned} \psi^+(x) =&e^{+i\delta_0}\psi_0(x) + ie^{+i\delta_1}\psi_0(x) = e^{+i\delta_0}\cos(kx - \delta_0) + ie^{+i\delta_1}\sin(kx - \delta_1) = \\ &e^{ikx} + \frac{1}{2}\left(e^{+2i\delta_0} - e^{+2i\delta_1}\right)e^{-ikx} \text{ при } x < -X, \end{aligned} \tag{89}$$

при $x < X$. Звідси

$$\begin{aligned}
S =&\frac{1}{2}\left(e^{+2i\delta_0}+e^{+2i\delta_1}\right)=\frac{1}{2}\left[\left(e^{+2i\delta_0}-1\right)+\left(e^{+2i\delta_1}-1\right)\right]+1= \\
&1+\frac{1}{2}e^{+i\delta_0}\left(e^{+\delta_0}-e^{-i\delta_0}\right)+\frac{1}{2}e^{+i\delta_1}\left(e^{+\delta_1}-e^{-i\delta_1}\right)= \\
&1+\frac{1}{2}e^{i\delta_0}\left(\cos\delta_0+i\sin\delta_0-\cos\delta_0+i\sin\delta_0\right)+ \\
&\frac{1}{2}e^{i\delta_1}\left(\cos\delta_1+i\sin\delta_1-\cos\delta_1+i\sin\delta_1\right)= \\
&1+ie^{i\delta_0}\sin\delta_0+ie^{i\delta_1}\sin\delta_1=1+\sum_{l=0,1}ie^{i\delta_l}\sin\delta_l.
\end{aligned} \tag{90}$$

і

$$\begin{aligned}
R =&\frac{1}{2}\left(e^{+2i\delta_0}-e^{+2i\delta_1}\right)=\frac{1}{2}\left[\left(e^{+2i\delta_0}-1\right)-\left(e^{+2i\delta_1}-1\right)\right]= \\
&1+\sum_{l=0,1}i(-1)^l e^{i\delta_l}\sin\delta_l.
\end{aligned} \tag{91}$$

Одержані результати можна узагальнити, записавши їх у формі, у якій прозорішим буде зв'язок із тривимірним випадком. Оскільки, симетрію потенціала щодо інверсії відносно початку координат можна також трактувати як інваріантність відносно поворотів на кут 180^0 відносно осі, перпендикулярної до осі Ox, то зв'язок із тривимірним випадком виглядає природним. Як відомо, при розгляді поворотів у тривимірному випадку, найзручнішими є полярні координати. Одновимірний випадок також можна переформулювати за допомогою "одновимірних полярних координат", якщо їх визначити у такий спосіб:

$$\begin{aligned}
r =&x, \\
\theta =&0 \text{ якщо } x > 0, \\
\theta =&\pi \text{ якщо } x < 0.
\end{aligned}$$

Тобто у одновимірному випадку θ набуває лише двох значень 0 і π, які відповідають напрямкам "вперед" і "назад". Такий підхід дає змогу записати хвильові функції (85) і (86) однією формулою

$$\psi^+(x) = e^{ikx} + g(\theta)e^{ikr} \text{ при } r > x, \tag{92}$$

із

$$
\begin{aligned}
g(0) =& S - 1 \\
g(\pi) =& R.
\end{aligned}
$$

Перший доданок e^{ikx} у цій формулі є не лише при $x < -X$, але і при $x > X$. Він описує не лише збіжну падаючу хвилю, але й розбіжну хвилю та був би повним розв'язком рівнянням Шредингера і при відсутності потенціала. Обидва доданки цієї хвильової функції описують незбурену хвильову функцію, яка є точним розв'язком рівняння Шредингера без потенціала, і розсіяну хвилю, існування якої пов'язане із дією потенціала.

Амплітуду розсіювання $f(\theta)$ можна виразити через зсуви фаз, якщо використати (91), (92) та формулу $f(\theta) = (1/ik)g(\theta)$. Тоді

$$
f(\theta) = k^{-1} \sum_{l=0,1} e^{il\theta} e^{i\delta_l} sin\delta_l. \tag{93}
$$

3.2 S - матриця

Хвильову функцію (92) можна подати у вигляді суми збіжної та розбіжної хвиль, записавши перший доданок у полярних координатах, подібно до того, як це зроблено для другого доданка. Тоді

$$
\psi_0^{(+)} = \delta_{\theta,\pi} e^{-i\mathbf{kr}} + [g(\theta) + \delta_{\theta,0}] e^{i\mathbf{kr}} \quad \text{при} \quad r > X. \tag{94}
$$

Нижній індекс "0" біля хвильової функції означає, що падаюча хвиля поширюється "вперед", тобто зліва направо. Оскільки ми вважаємо, що потенціал інваріантний відносно відбивання, то можна побудувати ще один розв'язок рівняння Шредингера, який відповідає розв'язкові (94), якщо відобразити його відносно початку координат. Операція відбивання відповідає заміні θ на $\pi - \theta$, тоді

$$
\psi_\pi^{(+)} = \delta_{\theta,0} e^{-i\mathbf{kr}} + [g(\pi - \theta) + \delta_{\theta,\pi}] e^{i\mathbf{kr}} \quad \text{при} \quad r > X. \tag{95}
$$

Тут нижній індекс π означає, що падаюча хвиля поширюється "назад", тобто справа наліво. Обидві функції (94) і (95) можна записати у вигляді однієї формули

$$
\psi_{\theta'}^{(+)} = \delta_{\theta,\pi-\theta'} e^{-i\mathbf{kr}} + [g(\theta' - \theta) + \delta_{\theta,\theta'}] e^{i\mathbf{kr}} \quad \text{при} \quad r > X. \tag{96}
$$

Довільна лінійна комбінація функцій (94) і (95) також буде деяким розв'язком рівняння Шредингера. Оскільки, будь-яку функцію від двозначної змінної θ можна записати у вигляді лінійної комбінації двох функцій $\delta_{\theta,0}$ і $\delta_{\theta,\pi}$ $\quad (\phi(\theta) = C_1\delta_{\theta,\pi} + C_2\delta_{\theta,0})$, то це дає змогу вибудувати розв'язок із збіжною хвилею $e^{-i\mathbf{kr}}$, домноженою на довільну функцію від θ. Нехай $\phi_1(\theta)$ і $\phi_2(\theta)$ – дві ортонормовані функції від θ у двовимірному векторному просторі лінійних комбінацій функцій зі значеннями $\theta = 0$ і $\theta = \pi$. За їх допомогою можна побудувати два відповідних розв'язки, комбінуючи функції (94) і (95)

$$\psi_\alpha^{(+)} = \phi(0)\psi_0^{(+)} + \phi(\pi)\psi_\pi^{(+)} = \sum_{\theta'=0,\pi} \phi_\alpha(\theta')\psi_\alpha^{(+)}(\theta'), \tag{97}$$

$$\psi_\alpha^{(+)} = \phi_\alpha(\pi - \theta)e^{-i\mathbf{kr}} + \sum_{\beta=1,2} S_{\alpha\beta}\phi_\beta(\theta)e^{i\mathbf{kr}} \quad \text{при} \quad r > X, \tag{98}$$

тут $\alpha = 1, 2$. Матриця $S_{\alpha\beta}$ має такий вигляд

$$S_{\alpha\beta} = \sum_{\theta,\theta'} \phi_\beta^*(\theta)[g(\theta' - \theta) + \delta_{\theta,\theta'}]\phi_\alpha(\theta'). \tag{99}$$

Матрицю $S_{\alpha\beta}$ називають S-матрицею; величина $S_{\alpha\beta}$ рівна амплітуді розбіжної хвилі типу β, одержаної внаслідок розсіювання збіжної хвилі типу α.

S-матриця є унітарною матрицею, тобто її елементи задовольняють співвідношення

$$\sum_{\beta=1,2} S_{\alpha\beta}S_{\gamma\beta} = \delta_{\alpha,\gamma}. \tag{100}$$

У випадку відсутності потенціала збіжна і розбіжна хвилі співпадають і, як видно із формули (98), S-матриця є одиничною матрицею.

Враховуючи властивість унітарності, можна побудувати інші два розв'язки рівняння Шредингера

$$\psi_\gamma^{(-)} = \sum_{\alpha=1,2} \psi_\alpha^+ S_{\alpha\gamma}^* = \sum_{\alpha=1,2} \phi_\alpha(\pi - \theta)S_{\alpha\gamma}^* e^{-i\mathbf{kr}} + \phi_\gamma(\theta)e^{i\mathbf{kr}} \ \text{при} \ \ r > X, \tag{101}$$

де $\alpha = 1, 2$. У цих розв'язках є одна розбіжна хвиля і сума збіжних хвиль. У розглянутих раніше розв'язках була одна збіжна хвиля та сума розбіжних хвиль. Зазначимо, що функцію із такими властивостями можна побудувати із розв'язків (98), зробивши заміну θ на $\pi - \theta$ і виконавши комплексне спряження, тобто

$$[\psi_\alpha^{(+)}(\pi - \theta)]^* = \phi_\alpha^*(\theta)e^{i\mathbf{kr}} + \sum_{\beta=1,2} S_{\alpha\beta}^*\phi_\beta^*(\pi - \theta)e^{-i\mathbf{kr}}. \tag{102}$$

Якщо підставити (102) у рівняння Шредингера, то можна переконатися, що вони є його розв'язками за умови, що потенціал – величина дійсна, тобто, якщо потенціал інваріантний відносно інверсії часу. У цьому випадку розв'язки (98) і (102) повинні описувати фізично однакові стани, що відрізняються лише фазовими множниками. Це, своєю чергою, призводить до умов, яким повинна задовольняти S-матриця, щоб вона була інваріантною відносно інверсії часу. Якщо фази вибрані так, що $\phi_\alpha(\theta)$ є дійсними величинами, то вимога інваріантності відносно інверсії призводить до вимоги симетрії S-матриці.

S-матрицю можна діагоналізувати, якщо потенціал – симетричний відносно інверсії. Для цього лише слід вибрати функції (87) базисними функціями. У полярних координатах ці стани мають такий вигляд

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \cos(kr + \delta_0) = \frac{1}{2}e^{-i\delta_0}[e^{-i\mathbf{kr}} + e^{2i\delta_0}e^{i\mathbf{kr}}] \text{ при } r > X, \quad , \\ \psi_1(x) &= e^{i\theta}\sin(kr + \delta_1) = \frac{1}{2}ie^{-i\delta_1}e^{i\theta}[e^{-i\mathbf{kr}} - e^{2i\delta_1}e^{i\mathbf{kr}}] \text{ при } r > X. \end{aligned} \tag{103}$$

Із наведених функцій стану можна утворити також інші функції стану, які матимуть інші сталі нормування та фазові множники, зокрема, такі

$$\psi_l = e^{il\theta}[e^{-i\mathbf{kr}} + (-1)^l e^{2i\delta_l}e^{i\mathbf{kr}}]. \tag{104}$$

Ці функції можна також записати у вигляді, подібному до (98), оскільки

$$\psi_l = -[e^{il(\pi-\theta)}e^{-i\mathbf{kr}} + e^{2i\delta_l}e^{i\theta}e^{i\mathbf{kr}}]. \tag{105}$$

Порівнюючи останню формулу із формулою (98)

$$\psi_\alpha^{(+)} = \phi_\alpha(\pi - \theta)e^{-i\mathbf{kr}} + \sum_{\beta=1,2} S_{\alpha\beta}\phi_\beta(\theta)e^{i\mathbf{kr}} \quad \text{при} \quad r > X, \tag{106}$$

приходимо до висновку, що

$$\phi_l(\theta) = e^{il\theta}, \tag{107}$$

а

$$S_{ll'} = e^{2i\delta_l}\delta_{ll'}. \tag{108}$$

Якщо відома S-матриця, то ми одержуємо повний опис процесу розсіювання. S-матриця дає змогу знайти розсіяні хвилі для усіх падаючих хвиль. У загальному випадку, коли разом із пружним розсіюванням існують також процеси непружного розсіювання, S-матриця пов'язує усі можливі стани, які можуть переходити одні в інші у процесі розсіювання. У цьому випадку індекси α і β є індексами усіх можливих каналів, а не просто індексами, які стосуються лише розсіювання "вперед" і "назад".

3.3 Розсіювання на δ - потенціалі

Розглянемо задачу розсіювання на короткодіючому потенціалі, відмінному від нуля в області, протяжність якої набагато менша від довжини хвилі частинки, що розсіюється, тобто

$$kX \ll 1. \tag{109}$$

Рівняння Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x), \tag{110}$$

перепишемо у вигляді

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = \frac{2mV(x)}{\hbar^2}\psi(x) = U(x)\psi(x), \tag{111}$$

де

$$U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x). \tag{112}$$

Рівняння (111) можна проінтегрувати по x у межах від $-X$ до X, поза якими потенціал рівний нулю. Тоді

$$\frac{d\psi(+X)}{dx} - \frac{d\psi(-X)}{dx} + k^2\int_{-X}^{X}\psi(x)dx = \int_{-X}^{X}U(x)\psi(x)dx. \tag{113}$$

Визначимо граничні умови на межі областей з різними значеннями потенціала: хвильова функція повинна бути неперервною, а поведінка її похідної залежить від поведінки потенціала. Якщо функція, яка описує поведінку потенціала є неперервною, то

$$\lim_{X\to 0}\int_{-X}^{X} U(x)\psi(x)dx = 0 \tag{114}$$

і похідна від хвильової фукнкції є неперервною разом із самою функцією. Якщо в околі деякої точки потенціальна функція має скінчений розрив, то застосовуючи теорему про середнє до інтеграла від добутку потенціала на хвильову функцію, одержимо

$$\int_{-X}^{X} U(x)\psi(x)dx = 2X\overline{\psi(x)U(x)}. \tag{115}$$

Перейшовши до границі $X \to 0$, знову одержуємо, що похідна від хвильової функції у точці розриву потенціала – неперервна. Якщо ж потенціал у деякій точці має нескінчений розрив (розрив другого роду), то

$$\int_{-X}^{X} U(x)\psi(x)dx$$

буде відмінним від нуля і похідна від хвильової функції вже не буде неперервною, а матиме розрив.

Для коороткодіючого потенціала, що задовольняє умову (109), хвильова функція не може дуже суттєво змінитися у області, в якій потенціал відмінний від нуля. Формула (113) дає змогу знайти зміну хвильової функції на кінцях відрізка із ненульовим значенням потенціала. Як видно із цієї формули, зміна хвильової функції визначається інтегралом від добутку хвильової функції на потенціал. Для спрощення розрахунків розглянемо потенціал "нульового розміру", а саме δ-потенціал

$$U(x) = -U_0\delta(x). \tag{116}$$

Підставимо (116) у (113) і спрямуємо $X \to 0$. Тоді для розв'язку із додатною парністю (87), одержимо

$$\frac{d\psi(0+)}{dx} - \frac{d\psi(0-)}{dx} = -2k\sin\delta_0 = U(0)\psi_0(0) = U_0\cos\delta_0. \tag{117}$$

Звідси, для хвилі додатної парності, зсув фази дорівнює

$$\tan\delta_0 = \frac{U_0}{2k}, \tag{118}$$

а відповідний матричний елемент S-матриці рівний

$$e^{2i\delta_0} = \frac{e^{i\delta_0}}{e^{-i\delta_0}} = \frac{\cos\delta_0 + i\sin\delta_0}{\cos\delta_0 - i\sin\delta_0} = \frac{1 + i\tan\delta_0}{1 - i\tan\delta_0} = \frac{1 + i(U_0/2k)}{1 - i(U_0/2k)} = \frac{2k + iU_0}{2k - iU_0}. \tag{119}$$

Розв'язок з непарною парністю (87) рівний нулю у початку координат, а тому зсув фаз також буде нульовим,

$$\begin{aligned} \delta_l &= 0, \\ e^{2i\delta_l} &= 1. \end{aligned} \tag{120}$$

Підставляючи (118) і (120) у (93), знаходимо для амплітуди розсіювання такі вирази

$$\begin{aligned} f(\theta) =& \frac{1}{2ik}[e^{2i\delta_0} - 1] = \frac{U_0}{k[2k - iU_0]}, \\ g(\theta) =& \frac{iU_0}{2k - iU_0}. \end{aligned} \tag{121}$$

Як видно із (93), функція $f(\theta)$ не залежить від θ, тобто амплітуди розсіювання "вперед" і "назад" є рівними між собою. Чому це має місце? Хвиля додатної парності розсіюється δ-потенціалом, а хвиля від'ємної парності ним зовсім не розсіюється. Оскільки, амплітуди хвиль додатної парності та від'ємної парності однакові при розсіюванні "вперед" і "назад", але у одній хвилі вони додаються, а в іншій - віднімаються, то різниця у розсіюванні "вперед" і "назад" може виникнути лише у випадку, коли у розв'язку присутні обидва розв'язки. Будь-які відмінності у розсіюванні "вперед" і "назад" виникають внаслідок інтерференції хвиль із додатною і від'ємною парностями.

Підставивши вираз $g(\theta) = iU_0/(2k - iU_0)$ у формулу (92), одержуємо розв'язок рівняння Шредингера при всіх значеннях k. Тепер розглянемо цей розв'язок не лише при дійсних, але й при комплексних k. Якщо k - комплексна величина, то її уявна частина даватиме вклад у дійсну частину показників експонент в (92). У цьому випадку, як дійсна, так і уявна частина експонент будуть із додатними показниками, а це спричинить безмежне зростання амплітуди хвилі на великих відстанях або при додатних, або при від'ємних значеннях x. Ці розв'язки не є фізичними, оскільки не задовольняють граничні умови, що накладаються на розв'язки рівняння Шредингера. Але, слід зазначити, що амплітуда розсіювання (121) і діагональний елемент матриці розсіювання (119) мають полюс при $k = (i/2)U_0$. Отже, при комплексному k, яке прямує до цього значення, амплітуда розсіяної хвилі в (92) зростає безмежно. Якщо віднормувати розглянутий розв'язок із комплексним k таким чином, щоб амплітуда розсіяної хвилі залишалася постійною, то перший доданок у (92), при прямуванні k до значення $k = (i/2)U_0$, буде прямувати до нуля і досягне нуля у полюсі. При $k = (i/2)U_0$ формула (92) дає розв'язок, який містить лише розбіжну хвилю, але немає збіжної хвилі. При додатних U_0 величина $K = (i/2)U_0$ - чисто уявна і додатна, показник експоненти - дійсний і від'ємний і амплітуда хвилі прямує до нуля на великих відстанях, тобто хвильова функція задовольняє граничні умови. Отже, уявне значення $k = (i/2)U_0$ дає фізичний розв'язок рівняння Шредингера. Оскільки амплітуда цієї хвилі прямує до нуля на великих відстанях, то цей розв'язок описує зв'язаний стан. Хвильова функція цього стану має вигляд

$$\psi_B(x) = e^{\frac{1}{2}U_0 r}. \tag{122}$$

Ця хвильова функція задовольняє рівняння Шредингера

$$H\psi_B(x) = E\psi_B(x) = -\hbar^2 \frac{U_0^2}{8m}\psi_B(x).$$

Хвильова функція (122) має цікаву особливість. Вона повністю зосереджена поза областю дії потенціала, але разом з тим, частинка перебуває у зв'язаному стані. Ця особливість пов'язана із нефізичністю δ -потенціала, але вона характерна і для потенціалів із скінченим радіусом дії, оскільки пов'язана із корпускулярно-хвильовим дуалізмом "хвиля-частинка". Якщо радіус дії потенціала малий порівняно із довжиною хвилі частинки, то хвиля обов'язково частково знаходитиметься поза ямою. Крім того, можуть існувати також розв'язки у вигляді стоячих хвиль, які, проте, матимуть "хвости", що поширюються за межі області дії потенціала. Зв'язування відображає хвильову природу частинки. Ця хвильова природа заставляє частинку "розмазуватися" у скінченій області, як у області дії потенціала, так і поза нею.

3.4 Розсіювання на подвійному δ - потенціалі

Недоліком δ - потенціала є те, що він не має розміру і цим суттєво відрізняється від будь-якого фізичного потенціала. Фізичні потенціали мають скінчений радіус дії і для них можливими є і такі процеси розсіювання, для яких довжина хвилі падаючих частинок буде меншою від радіуса дії потенціала. Можливі також і резонанси, для яких ціле число півхвиль точно покриває лінійний розмір області дії потенціала і коли, як наслідок, можуть виникати стоячі хвилі. Усі процеси такого типу, в принципі не можуть відбуватися для δ - потенціала, радіус дії якого - нульовий.

Проте і для δ - потенціала можна штучно ввести характерний розмір, узагальнивши його. З цією метою розглядають систему, що містить два δ - потенціали, відокремлених один від одного скінченою відстанню. Щоб зберегти симетрію відносно інверсії, центруємо обидві δ - функції у точках $x = +a/2$ і $x = -a/2$. Тобто $U(x)$ буде

$$U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x) = -\frac{1}{2} U_0 \left[\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + \delta\left(x + \frac{a}{2}\right) \right]. \qquad (123)$$

Щоб "сила" подвійного δ - потенціала була такою ж, як і одинарного, слід вважати, що "сила" кожного δ - потенціала зокрема рівна $1/2\ U_0$. Потенціал (123) переходить у δ - потенціал (116) при $a = 0$. Щоб розв'язати рівняння Шредингера, проінтегруємо його по x від $\frac{a}{2} - \varepsilon$ до $\frac{a}{2} + \varepsilon$.

$$\frac{d\psi(\frac{a}{2}+\varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(\frac{a}{2}-\varepsilon)}{dx} + k^2 \int_{\frac{a}{2}-\varepsilon}^{\frac{a}{2}+\varepsilon} \psi(x)\,dx = \int_{\frac{a}{2}-\varepsilon}^{\frac{a}{2}+\varepsilon} U(x)\psi(x)\,dx = -\frac{1}{2} U_0 \psi(\frac{a}{2}). \qquad (124)$$

Поділивши це рівняння на $\psi(a/2)$ та знехтувавши інтегралом зліва, який має порядок величини ε, одержуємо

$$\frac{1}{\psi(\frac{a}{2})} \frac{d\psi(\frac{a}{2}+\varepsilon)}{dx} - \frac{1}{\psi(\frac{a}{2})} \frac{d\psi(\frac{a}{2}-\varepsilon)}{dx} = -\frac{1}{2} U_0. \qquad (125)$$

Оскільки, сама функція $\psi(x)$ неперервна при $x = a/2)$, то її значення при $x = (a/2 \pm \varepsilon)$ рівні між собою. Зазначимо, що (125) не залежить від нормування, оскільки в неї входить логарифмічна похідна від хвильової функції.

Використаємо умову (125) для "зшивання" розв'язків з обох сторін від області дії δ-потенціала. Точні розв'язки рівняння Шредингера для інтервалу $-1/2a < x < +1/2a$ з додатною або від'ємною парністю – просто відповідні розв'язки для вільної частинки

$$\psi_0(x) = \cos(kx), \quad \frac{1}{\psi_0} \frac{d\psi_0}{dx} = -k \tan(kx), \quad -\frac{1}{2} a \le x \le \frac{1}{2} a, \qquad (126)$$

$$\psi_1(x) = \cos(kx), \quad \frac{1}{\psi_1}\frac{d\psi_1}{dx} = -k\cot(kx), \quad -\frac{1}{2}a \le x \le \frac{1}{2}a. \tag{127}$$

Поза сферою дії потенціала власні функції різної парності виражаються звичайними формулами, але із зсувом фаз, тобто

$$\psi_0(x) = \cos(kx \pm \delta_0), \quad \frac{1}{\psi_0}\frac{d\psi_0}{dx} = -k\tan(kx \pm \delta_0), \quad -\frac{1}{2}a \le x \le \frac{1}{2}a, \tag{128}$$

$$\psi_1(x) = \cos(kx \pm \delta_1), \quad \frac{1}{\psi_1}\frac{d\psi_1}{dx} = -k\cot(kx \pm \delta_1), \quad -\frac{1}{2}a \le x \le \frac{1}{2}a. \tag{129}$$

Величини ж зсувів фаз можна знайти із умов зшивання обидвох розв'язків (126), (127) і (128), (129) в точці $x = 1/2a$, тобто використовуючи формулу (125), яка дає

$$-k\tan\left(\frac{1}{2}ka + \delta_0\right) + k\tan\left(\frac{1}{2}ka\right) = -\frac{1}{2}U_0, \tag{130}$$

$$k\cot\left(\frac{1}{2}ka + \delta_1\right) - k\cot\left(\frac{1}{2}ka\right) = -\frac{1}{2}U_0. \tag{131}$$

Розв'язуючи ці рівняння відносно δ_0 і δ_1, знаходимо

$$\cot\delta_0 = \tan\left(\frac{1}{2}ka\right) + \frac{2k}{U_0}\sec^2\left(\frac{1}{2}ka\right) = \frac{4k/U_0 + \sin(ka)}{1+\cos(ka)}, \tag{132}$$

$$\cot\delta_1 = \cot\left(\frac{1}{2}ka\right) + \frac{2k}{U_0}\csc^2\left(\frac{1}{2}ka\right) = \frac{4k/U_0 - \sin(ka)}{1-\cos(ka)}. \tag{133}$$

Із останніх наведених виразів можна зробити такі висновки.

1. При $ka = 2\pi n$ значення зсувів фаз (132) і (133) зводяться до значень (118) і (120) для одиничного δ-потенціала. Ці результати відповідають також випадку, коли $a = 0$, тобто коли обидва δ-потенціали стають еквівалентними, а також і всі випадки, коли на проміжку між δ-потенціалами вкладається ціла кількість довжин хвиль.

2. Зсув фаз $\delta_0 = 0$ при $ka = (2n+1)\pi$ і зсув фаз $\delta_1 = 0$ при $ka = 2\pi n$, оскільки знаменники у виразах (132) і (133) у цих точках дорівнюють нулю. Цей висновок підтверджується також розглядом виразу (124). Для випадку $\psi(1/2a)$ права частина (124) рівна нулеві і тому розрив похідної від хвильової функції у точці $1/2a$ відсутній, а тому обидва розв'язки ідентичні до розв'язків , що відповідають вільній частинці, тобто випадку відсутності потенціала, іншими словами, ніякого зсуву фаз немає. Такий результат одержують завжди для розв'язків із додатною парністю коли на інтервалі між $\pm a$ точно укладається непарна кількість півхвиль і для розв'язків із від'ємною парністю, коли на тому ж інтервалі точно укладається парна кількість півхвиль.

3. Для значень k, що прямують до нуля, вирази (132) і (133) набувають вигляду

$$\tan\delta_0 = \frac{U_0}{2k\left(1+\frac{1}{2}aU_0\right)} \quad \text{при } k \to 0,$$

$$\tan\delta_1 = \frac{kU_0a^2}{8\left(1-\frac{1}{2}aU_0\right)} \quad \text{при } k \to 0.$$

Зсув фаз для розв'язків із від'ємною парністю прямує до нуля, а для розв'язків із додатною парністю прямує до зсуву фаз для одиничного δ-потенціала (118).

4. При великих k вирази (132) і (133) набувають вигляду

$$\tan\delta_0 = \frac{U_0}{4k}(1+\cos(ka)) \quad \text{при } k \to \infty,$$

$$\tan\delta_1 = \frac{U_0}{4k}(1-\cos(ka)) \quad \text{при } k \to \infty.$$

Тобто, тангенси обидвох зсувів фаз осцилюють поміж нулем і значенням $U_0/2k$, яке відповідає одиничному δ-потенціалу.

Найцікавішим значеннями k є проміжні значення, для яких чисельники виразів (132) і (133) рівні нулю. У цьому випадку для амплітуди розсіювання одержують точну формулу

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0,1} e^{il\theta}e^{i\delta_l}\sin\delta_l = \frac{1}{k}\sum_{l=0,1}\frac{e^{il\theta}}{\cot\delta_l - i}. \tag{134}$$

Відповідно, амплітуда розсіювання досягає максимума, або "резонансу", коли $\cot\delta_0 = 0$, або $\cot\delta_1 = 0$. Із виразів (132) і (133) слідує, що

$$\cot\delta_0 = 0 \quad \text{при} \quad \sin(ka) = -\frac{4k}{U_0}, \tag{135}$$

$$\cot\delta_0 = 1 \quad \text{при} \quad \sin(ka) = \frac{4k}{U_0}. \tag{136}$$

При $U_0 a \gg 1$ трансцендентні рівняння (135) і (136) мають багато розв'язків і тому існує багато резонансів. В околі кожного такого резонансу, тобто у околі $\delta_l = 0$, можна розкласти $\cot\delta_l$ у ряд за степенями енергії, зберігши у розкладі лише лінійні вклади. Тоді одержимо

$$\cot\delta_l = \frac{2}{\Gamma}(E - E_0), \tag{137}$$

де E_0 – значення енергії, для якої $\cot\delta_l = 0$, а Γ визначається співвідношенням

$$\frac{2}{\Gamma} = \left[\frac{d}{dE}(\cot\delta_l)\right]_{E=E_0}.$$

В околі значення енергії E_0 вираз (134) для амплітуди розсіювання можна записати, як

$$f_l(\theta) = \frac{1}{k}\frac{\frac{1}{2}e^{il\theta}\Gamma}{(E - E_0) + \frac{1}{2}i\Gamma}, \tag{138}$$

де $f_l(\theta)$ – вклад у амплітуду розсіювання від парціальної хвилі, що призводить до резонансу. Цей вираз дає типову форму резонансної кривої, для якої Γ – півширина резонансу.

Точна амплітуда розсіювання (134) має полюси при $\cot\delta_l = i$. Із формул (132) і (133), одержуємо

$$\cot\delta_0 - i = \frac{(4k/U_0 + \sin(ka)) - i(1 + \cos(ka))}{1 + \cos(ka)} = -i\frac{1 + e^{ika} + 4ik/U_0}{1 + \cos(ka)}, \tag{139}$$

$$\cot\delta_1 - i = \frac{(4k/U_0 - \sin(ka)) - i(1 - \cos(ka))}{1 - \cos(ka)} = -i\frac{1 - e^{ika} + 4ik/U_0}{1 - \cos(ka)}. \tag{140}$$

Із цих виразів видно, що полюси амплітуди розсіювання існують лише при уявних значеннях k, і тому, якщо $ik = -\lambda$, деλ є дійсною величиною, то приходимо до таких двох рівнянь

$$1 + e^{-\lambda a} - \frac{4\lambda}{U_0} = 0 \quad \text{для} \quad \delta_0, \tag{141}$$

$$1 - e^{-\lambda a} - \frac{4\lambda}{U_0} = 0 \quad \text{для} \quad \delta_1. \tag{142}$$

Із рівняння (141) випливає, що завжди існує один зв'язаний стан для додатної парності. Це можна побачити, розглянувши графік, на якому зображено $1 + e^{-\lambda a}$ і $4\lambda/U_0$, як функції від λ. Графіки, що зображають ці функції перетнуться у одній точці. Із рівняння (142) також видно, що при великих значеннях U_0 для від'ємної парності існуватиме єдиний зв'язаний стан, а при малих U_0 не існуватиме жодного зв'язаного стану. У цьому також можна переконатися, розглянувши графік на якому зображено $1 - e^{-\lambda a}$ і $4\lambda/U_0$, як функції від λ. Критичне значення U_0 можна знайти із умови, коли обидві функції матимуть однаковий нахил при $\lambda = 0$, тобто із умови

$$U_0 = \frac{4}{a}. \tag{143}$$

При значеннях U, що переважають значення U_0 (143) буде існувати один зв'язаний стан. У цьому можна переконатися безпосередньо розв'язуючи рівняння Шредингера для зв'язаних станів.

3.5 Розсіювання на потенціалі $U = U_0/\cosh(x)$

Розглянемо ще один цікавий приклад одновимірного потенціала, який повністю прозорий ([9], [10]). Для одержання такого потенціала представимо хвильову функцію задачі у вигляді

$$\psi(x) = \exp\left(-\int_x W(x)dx\right). \tag{144}$$

Тоді

$$\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = -W(x), \tag{145}$$

і функція $W(x)$ одержала назву суперпотенціала. Підставивши (144) у рівняння Шредингера, приходимо до рівняння

$$V_-(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(W^2(x) - W'(x)\right) + E, \tag{146}$$

що пов'язує суперпотенціал з потенціалом.

Припустимо, що потенціал постійний, тобто

$$V_-(x) = W^2(x) - W'(x) = \kappa^2 = const. \tag{147}$$

Тоді, враховуючи, що $\psi^{'}(x)/\psi(x) = -W(x)$, а

$$W^{'}(x) = -\frac{\psi^{''}(x)}{\psi(x)} + \frac{(\psi^{'})^2(x)}{\psi^2(x)}, \tag{148}$$

приходимо до такого рівняння

$$\frac{\psi^{''}(x)}{\psi(x)} = \kappa^2. \tag{149}$$

Це рівняння є звичайним диференціальним рівнянням другого порядку із постійними коефіцієнтами, розв'язком якого є

$$\psi(x) = A\cosh(\kappa(x - x_0)). \tag{150}$$

Відповідний суперпотенціал матиме вигляд

$$W(x) = -\frac{\psi^{'}(x)}{\psi(x)} = -\kappa\tan(\kappa(x - x_0)), \tag{151}$$

а

$$V_+(x) = W^2(x) + W^{'}(x) = \kappa^2\left[1 - \frac{2}{\cosh(\kappa(x - x_0)}\right]. \tag{152}$$

Цей потенціал має нульову енергію основного стану, хвильовою функцією якого є

$$\psi_0^{(+)}(x) \sim \frac{1}{\cosh(\kappa(x - x_0))}. \tag{153}$$

Простий аналіз показує, що потенціал V_+ буде безвідбивним, тобто за будь-якої енергії коефіцієнт проходженя буде рівним 1. Справді, розглянемо рівняння плоскої хвилі $\psi^{(-)}(x) = \exp(iqx)$, яке є розв'язком рівняння Шредингера з потенціалом V_-. Тоді розв'язок з потенціалом V_+ можна знайти, як

$$\psi^{(+)}(x) = \left(\frac{d}{dx} + W(x)\right)\exp(iqx) = [iq - \kappa\tanh(\kappa(x - x_0))]\exp(iqx). \tag{154}$$

Асимптотична поведінка цієї функції є такою

$$\psi^{(+)}(x)|_{x\to-\infty} = (iq + \kappa)\exp(iqx), \tag{155}$$

$$\psi^{(+)}(x)|_{x\to+\infty} = (iq - \kappa)\exp(iqx). \tag{156}$$

Звідси видно, що S - матрицею є

$$S = \frac{iq - \kappa}{iq + \kappa}.$$

Відсутність вкладу у вигляді $\exp(-iqx)$ свідчить, що відбивання – відсутнє.

Література

[1] Гейзенберг В. Теория атомного ядра. Москва: ИЛ, 1953. 156с.

[2] Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики т. 2. Москва: Наука, 1972. 936с.

[3] Ландау Л. Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика т. 3. Квантовая теория. Нерелятивистская теория. Москва: Наука, 1974. 752с.

[4] Давыдов А. С. Квантовая механика. Москва: Наука, 1973. 704с.

[5] Ведринский Р.В.Нерелятивистская квантовая механика ч. 2. Ростов Дон: 2008. 557с.

[6] Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Москва: Наука, 1971. 544с.

[7] Вакарчук І. О. Квантова механіка. Львів: ЛНУ, 2012. 872с.

[8] Липкин Г. Квантовая механика. Москва: Мир, 1977. 592с.

[9] Griffiths D. Introduction to Quantum Mechanics. Prentice Hall. 2004.ISBN 0-13-111892-7.

[10] Kwong W., Rosner J.L. Supersymmetric Quantum Mechanics and Inverse Scattering. Progress of Theoretical Physics Supplement. No. 86, 1986, p.p. 366-376.