ISSN 0868–5886 НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 2012, том 22, № 1, с. 5–12

ОБЗОРЫ

УДК 534.874+534.26+534.286+530.16

© Б. П. Шарфарец

СВОЙСТВА ОБЩЕЙ И ПАРЦИАЛЬНЫХ АМПЛИТУД РАССЕЯНИЯ, А ТАКЖЕ ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. Ч. I. СВОЙСТВА ПАРЦИАЛЬНЫХ АМПЛИТУД РАССЕЯНИЯ (ОБЗОР)

Написание обзора вызвано желанием экстраполяции мощно разработанной квантовомеханической теории рассеяния на случай акустического рассеяния. Это, возможно, может оказать помощь в решении акустических задач рассеяния, в частности при решении задач по расчету акустического радиационного давления. В данной части I обзора отмечается идентичность постановки обеих задач рассеяния. Далее в основном приводятся результаты центрального потенциального квантовомеханического рассеяния. Основное внимание уделяется описанию аналитических свойств радиальных волновых функций, функций Йоста, парциальных амплитуд рассеяния и их особенностей. Приведены уравнения для вычисления парциальных фазовых сдвигов. Рассмотрены резонансы, вызванные полюсами матрицы рассеяния, отличными от полюсов, отвечающих связанным состояниям.

Кл. сл.: квантовомеханическая теория рассеяния, волновое рассеяние, амплитуда рассеяния, резонансное рассеяние

ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В своих предыдущих работах [1, 2 и др.] автор уже останавливался на некоторых свойствах амплитуды рассеяния применительно к акустическому случаю, когда поле в трехмерном безграничном пространстве описывается скалярным уравнением Гельмгольца. Основное внимание при этом уделялось разбору аналитических свойств амплитуды рассеяния как функции сферических углов θ, φ. Вместе с тем в случае стационарного квантовомеханического рассеяния основным уравнением является стационарное же уравнение Шредингера, идентичное скалярному уравнению Гельмгольца с переменным показателем преломления. В квантовой механике теория рассеяния, которая является одним из ее основных инструментов исследования, исторически была разработана гораздо глубже, чем волновая теория рассеяния, и, в частности теория рассеяния акустических волн (см., например, комментарий на эту тему в [3, с. 192]). Особенно разработанной является теория квантовомеханического рассеяния для случая центрального потенциала. Именно этот вид рассеяния является наиболее популярным в теории акустического радиационного давления. Поэтому, представляется целесообразным сделать обзор тех результатов квантовомеханической теории рассеяния, которые могут быть использованы в теории акустического рассеяния вообще и, в частности в теории радиационного давления, где активно используется амплитуда рассеяния включения.

Целью настоящей работы является обзор методов квантовомеханической стационарной теории рассеяния, могущих быть экстраполированными в акустической теории рассеяния гармонических сигналов.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЗАДАЧ РАССЕЯНИЯ

Акустический случай

Пусть задана безграничная однородная среда плотностью ρ_0 и скоростью звука c_0, в которой находится некая неоднородность. В пространстве распространяется плоская гармоническая волна (временной множитель $e^{-i\omega t}$ ниже везде опущен)

$$u_i = e^{ik\hat{\mathbf{k}}_i\mathbf{x}}. \tag{1}$$

В результате взаимодействия u_i с неоднородностью дополнительно возникает рассеянная волна u_s. Тогда результирующее поле u равно их сумме

$$u = u_i + u_s = e^{ik\hat{\mathbf{k}}_i\mathbf{x}} + u_s. \tag{2}$$

Здесь $k = \omega / c_0$ — волновое число; $\hat{\mathbf{k}}_i = \mathbf{k}_i / k$ — единичный вектор, совпадающий по направлению с волновым вектором $\mathbf{k}_i$ распространения плоской волны (1); $\mathbf{x}$ — радиус-вектор точки наблюдения $\mathbf{x} = (x, y, z) = (r, \theta, \varphi)$ в декартовых и сферических координатах.

В акустике обычно рассматриваются две модели рассеяния (см., например, [4]).

Первую модель условно назовем "случай рассеяния на неоднородном проницаемом компактном включении" (в [4]: "scattering by a penetrable inhomogeneous medium of compact support"), когда математически задача рассеяния формулируется следующим образом:

$$\Delta u + k^2 n^2(\mathbf{x}) u = 0, \ \mathbf{x} \in R^3, \tag{3}$$

$$u = u_i + u_s, \tag{4}$$

$$\lim_{r\to\infty} r\left(\frac{\partial u_s}{\partial r} - iku_s\right) = 0. \tag{5}$$

Здесь $n(\mathbf{x}) = c_0 / c(\mathbf{x})$ — показатель преломления; $c(\mathbf{x})$ — возмущенная скорость звука в области неоднородного включения. Предполагается только, что носитель функции $1 - n(\mathbf{x})$ имеет конечные размеры (т. е. область возмущения является компактной). Уравнение (3) при принятии обозначения

$$U(\mathbf{x}) = k^2(1 - n^2(\mathbf{x}))$$

легко сводится к следующему виду:

$$\Delta u + k^2 u = U(\mathbf{x}) u. \tag{3а}$$

Вторую модель рассеяния назовем "рассеяние на непроницаемом включении" (в [4]: "scattering by an impenetrable obstacle"), про которое сразу известно, что включение занимает конечную область D. Математически задача формулируется так:

$$\Delta u + k^2 u = 0, \ \mathbf{x} \in R^3 \setminus D; \tag{6}$$

$$u = u_i + u_s; \tag{7}$$

$$\mathrm{M}(u) = 0, \ \mathbf{x} \in \partial D; \tag{8}$$

$$\lim_{r\to\infty} r\left(\frac{\partial u_s}{\partial r} - iku_s\right) = 0. \tag{9}$$

Условия (5) и (9) — условия излучения Зоммерфельда, условие (8) означает запись в символическом виде краевых условий на поверхности ∂D — границе области D. Это могут быть однородные условия Дирихле, Неймана, импедансные условия или условия сшивания решений на границе. Вопрос единственности решения задач (3)–(5) и (6)–(9) изучен достаточно подробно (см., например, обсуждение вопроса и обзор работ по этому поводу в [4]).

Квантовомеханический случай

В квантовой механике изменение состояния квантовых объектов описывается уравнением Шредингера [5]. Так, для частицы массой m, движущейся под воздействием силы, порождаемой потенциалом $V(x, y, z, t)$, нестационарное уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(x, y, z, t)$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{x}, t)\Psi. \tag{10}$$

Здесь $\hbar$ — постоянная Планка. В случае стационарного потенциала $V(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{x})$ решение (10) можно представить в виде

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{-(i/\hbar)\mathrm{E}t} \psi(\mathbf{x}),$$

где Е — полная энергия квантовой системы, а $\psi(\mathbf{x})$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\mathbf{x})\psi = \mathrm{E}\psi. \tag{11}$$

После введения обозначений

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \mathrm{E}; \ U(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{x})$$

уравнение (11) сводится к виду

$$\Delta \psi + k^2 \psi = U(\mathbf{x})\psi. \tag{12}$$

Как видно, уравнение (12) идентично уравнению (3а): оба представляют собой уравнения Гельмгольца с неоднородной правой частью, в которую линейно входит искомое решение. Решение ψ, также как и в волновом рассеянии, ищется в виде (2) как сумма первичной ψ_i и рассеянной ψ_s волн

$$\psi = \psi_i + \psi_s = e^{ik\hat{\mathbf{k}}_i \mathbf{x}} + \psi_s. \tag{13}$$

Краевые условия на бесконечности для рассеянной волны также представляют собой условия излучения Зоммерфельда вида (5) или (9) (см., например, [6, с. 64])

$$\lim_{r\to\infty} r\left(\frac{\partial \psi_s}{\partial r} - ik\psi_s\right) = 0. \tag{14}$$

Отметим, что задача (3)–(5) может в ряде случаев трансформироваться в задачу (6)–(9) и обратно, хотя в некоторых случаях такая трансформация невозможна. Например, в случае абсолютно жестких или мягких включений. Приведем пример такой трансформации.

Пусть область D, включающая в себя начало координат, представляет собой жидкость с возмущенной плотностью среды $\rho(\mathbf{x})$ и скорости звука $c(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in D$. Распределение скорости и плотности, таким образом, в этом случае имеет вид

$$c_1(\mathbf{x}) = \begin{cases} c_0 = \text{const}, & \mathbf{x} \in R \setminus D, \\ c(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D; \end{cases}$$

$$\rho_1(\mathbf{x}) = \begin{cases} \rho_0 = \text{const}, & \mathbf{x} \in R \setminus D, \\ \rho(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D. \end{cases}$$

Рассматриваемую задачу можно решать в рамках второй модели рассеяния путем сшивания решений внутри и вне области D на границе ∂D, а можно решать в рамках первой модели рассеяния. Запишем в этом случае уравнение для амплитуды звукового давления [7]:

$$\Delta p + k^2 n^2(\mathbf{x}) p - \frac{1}{\rho_1} \nabla \rho_1 \cdot \nabla p_1 = 0, \quad \mathbf{x} \in R^3, \qquad (15)$$

где $n(\mathbf{x}) = c_0 / c_1(\mathbf{x})$ — показатель преломления, равный единице в области $R^3 \setminus D$. Переписывая (15) в виде неоднородного уравнения Гельмгольца, получаем уравнение вида (3а) или (12)

$$\Delta p + k^2 p = Up,$$

где

$$U(\mathbf{x}) = k^2(1 - n^2(\mathbf{x})) + \frac{1}{\rho} \nabla \rho \cdot \nabla p.$$

Аналитические свойства парциальных амплитуд квантовомеханического рассеяния. Сферически симметричные потенциалы

Теория рассеяния в квантовой механике занимает одно из центральных мест и служит мощным инструментом решения ее задач. Квантовомеханическому рассеянию посвящен большой объем публикаций. Упомянем лишь некоторые из них [6, 8–20 и др.]. Наиболее разработанным является случай сферически симметричного (центрального) потенциала

$$U(\mathbf{x}) = U(|\mathbf{x}|) = U(r).$$

В этом случае рассматривается уравнение (3а) либо (12) в сферической системе координат. Примем обозначения уравнения (12). Понятно, что не снижающий общности рассуждений выбор падающей волны в виде

$$u_i = e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}, \qquad (16)$$

обеспечивает азимутальную симметрию всей задачи. Элементарное решение ищется в этом случае в виде [6, с. 66]

$$\psi_l(r,\theta) = \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos\theta), \ l = 0,1,2,... \qquad (17)$$

Решение $u_l(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r)\right) u_l = 0. \qquad (18)$$

После обозначения $\lambda = l + 1/2$ последнее уравнение приводится к виду

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{\lambda^2 - 1/4}{r^2} - U(r)\right) u_l = 0. \qquad (18а)$$

В этом уравнении параметры k и λ являются четными.

К уравнениям (18), (18а) необходимо добавить граничные условия при $r = 0$ и $r \to \infty$. Для обеспечения конечности решения (17) $\psi_l(r,\theta)$ при $r = 0$ ставится следующее краевое условие для радиальных волновых функций u_l:

$$u_l(0) = 0. \qquad (19)$$

Краевое условие для $u_l(r)$ при $r \to \infty$ ставится таким образом, чтобы обеспечивалось асимптотическое поведение общего решения (14). При $r \to \infty$ решение (13) с учетом краевого условия (14) принимает следующий асимптотический вид:

$$\psi = \psi_i + \psi_s \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikr\cos\theta} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}. \qquad (20)$$

Здесь $f(\theta)$ — амплитуда рассеяния, зависящая не только в данном случае от полярного угла θ (в общей постановке задачи f зависит от обоих сферических углов θ, φ), но и от параметра $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\mathrm{E}}$ в квантовой механике или от волнового числа k в случае волнового рассеяния. Таким образом, амплитуда рассеяния есть функция, характеризующая асимптотическое поведение рассеянной волны.

При отсутствии потенциала $U(r) \equiv 0$ уравнение (18) приводится к виду

$$\frac{\mathrm{d}^2 u_l}{\mathrm{d}r^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) u_l = 0. \qquad (21)$$

В качестве решений уравнения (21) используются функции $u^0{}_l(r)$ (см., например, [10]):

- Рикатти—Бесселя:

$$u^0{}_l(r) = \hat{\mathrm{j}}_l(kr) = kr\,\mathrm{j}_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\,\mathrm{J}_{l+1/2}(kr);$$

- Рикатти—Неймана:

$$u^0{}_l(r) = \widehat{\mathrm{n}_l}(kr) = kr\,\mathrm{n}_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\,\mathrm{N}_{l+1/2}(kr);$$

- Рикатти—Ханкеля:

$$u^0{}_l(r) = \widehat{\mathrm{h}_l}^{(1,2)}(kr) = kr\,\mathrm{h}_l{}^{(1,2)}(kr) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\,\mathrm{H}_{l+1/2}{}^{(1,2)}(kr).$$

Здесь j_l, n_l, h_l — сферические, а $\mathrm{J}_{l+1/2}$, $\mathrm{N}_{l+1/2}$, $\mathrm{H}_{l+1/2}$ — цилиндрические функции соответственно Бесселя, Неймана и Ханкеля.

От асимптотики (20) легко перейти к асимптотике парциальных волновых функций u_l [10, с. 221]:

$$u_l(r) \underset{r\to\infty}{\to} \hat{\mathrm{j}}_l(kr) + k\alpha_l(k)\widehat{\mathrm{h}_l}^{(1)}(kr) \sim$$

$$\sim \sin(kr - \frac{l\pi}{2}) + k\alpha_l(k)e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})}. \quad (22)$$

Здесь α_l — парциальные амплитуды рассеяния. Слагаемое $\hat{\mathrm{j}}_l$ соответствует "волновой функции налетающей свободной частицы", угловой момент которой равен l, а слагаемое $k\alpha_l\,\mathrm{h}_l^{(1)}$ соответствует рассеянной уходящей волне. Справа в (22) стоят асимптотики стоящих слева функций при $r\to\infty$. Имеет место соотношение между общей амплитудой рассеяния $f(\theta)$ и парциальными амплитудами рассеяния α_l (см., например, [15]):

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

$$= \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\alpha_l P_l(\cos\theta). \quad (23)$$

Здесь S_l — элементы матрицы рассеяния; имеет место равенство [9]

$$S_l = e^{2i\delta_l}.$$

Если рассеяние упругое, тогда $|S_l| = 1$, т. к. δ_l — действительные числа, и парциальные амплитуды можно выразить непосредственно через фазы рассеяния δ_l:

$$\alpha_l = \frac{i}{2k}(1-S_l) = \frac{1}{k}e^{i\delta_l}\sin\delta_l. \quad (24)$$

Как видно из (24), характер и аналитические свойства парциальных амплитуд рассеяния α_l как функций комплексного переменного k полностью определяются соответствующими аналитическими свойствами матрицы рассеяния $S_l(k)$.

С учетом ортогональности полиномов Лежандра на интервале $\theta\in[0,\pi]$ справедливо соотношение [10, с. 110]

$$\alpha_l = \frac{1}{2}\int_0^{\pi} f(\theta)P_l(\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta. \quad (24а)$$

Таким образом, пара соотношений (23), (24а) связывает общую и парциальные амплитуды рассеяния: если известна общая, то всегда можно найти парциальные и обратно.

Из асимптотики (22) с учетом (24) [10, с. 221] имеем:

$$u_l(r) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{i\delta_l}\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l). \quad (25)$$

Как видно, при больших r истинная радиальная функция $u_l(r)$ пропорциональна свободной радиальной функции

$$\hat{\mathrm{j}}_l(kr) \underset{r\to\infty}{\to} \sin(kr - \frac{l\pi}{2}),$$

однако ее осцилляции сдвинуты на величину δ_l.
В работе [14, с. 21] приведены дифференциальные уравнения для так называемых фазовых функций $\delta_l(r)$ таких, что

$$\lim_{r\to\infty}\delta_l(r) = \delta_l, \quad (26)$$

а именно

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\delta_l(r) = -\frac{1}{k}U(r)\widehat{D}_l^{\,2}(kr)\sin^2\left(\widehat{\delta}_l(kr) + \delta_l(r)\right), \quad (27)$$

где

$$\widehat{D}_l(kr) = \left[\hat{\mathrm{j}}_l^{\,2}(kr) + \widehat{\mathrm{n}_l}^{\,2}(kr)\right]^{1/2},$$

$$\widehat{\delta}_l(kr) = -\mathrm{arctg}\left[\frac{\hat{\mathrm{j}}_l(kr)}{\widehat{\mathrm{n}_l}(kr)}\right].$$

После решения уравнений (27) искомые фазы находятся вычислением асимптотик (26).

Как видно из дифференциального уравнения (27), при действительных потенциале $U(r)$ и волновом числе k фазовая функция $\delta_l(r)$, а следовательно, и фаза δ_l также являются действительными, в противном случае фазы являются комплексными.

Для полного сечения рассеяния σ и парциальных сечений рассеяния справедливы выражения [10]:

$$\sigma = \sum_l \sigma_l,$$

$$\sigma_l = 4\pi(2l+1)|\alpha_l|^2 = 4\pi(2l+1)\frac{\sin^2\delta_l}{k^2}.$$

Большое значение в квантовомеханической теории рассеяния для изучения свойств волновой функции ψ из уравнения (12) в общем случае потенциала $U(\mathbf{x})$ и падающей плоской волны общего положения (1)

$$\psi_i = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{x}}$$

имеет интегральное уравнение Липпмана—Швингера [5, с. 328]:

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi}\int_{R^3}\frac{\exp(ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|)}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}U(\mathbf{y})\psi(\mathbf{y})\mathrm{d}^3y, \quad (28)$$

откуда при $r\to\infty$ получается выражение для амплитуды рассеяния $f(\mathbf{k}_i,\theta,\varphi)$ [6, с. 69] (возникает зависимость от волнового вектора $\mathbf{k}_i$ падающей волны):

$$f(\mathbf{k}_i,\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int_{R^3}\exp(-i\mathbf{k}_s\mathbf{y})U(\mathbf{y})\psi(\mathbf{y})\mathrm{d}^3y. \quad (29)$$

Здесь $\mathbf{k}_s = (k,\theta,\varphi)$ — волновой вектор, направленный в точку наблюдения $\mathbf{x} = (r,\theta,\varphi)$.

В случае центрального потенциала и падающей волны вида (16) уравнение (28) сводится к интегральным уравнениям Липпмана—Швингера для парциальных волновых функций [10, с. 223]:

$$u_l(r) = \hat{\mathrm{j}}_l(kr) + \int_0^\infty G_{l,k}(r,r')U(r')u_l(r')\mathrm{d}r', \quad (28а)$$

где

$$G_{l,k}(r,r') = -\frac{1}{k}\hat{\mathrm{j}}_l(kr_<)\widehat{\mathrm{h}}_l^{(1)}(kr_>), \quad r_< = \min(r,r'),$$
$$r_> = \max(r,r'),$$

а (29) сводится к выражениям для парциальных амплитуд рассеяния [10, с. 224]:

$$\alpha_l = -\frac{1}{k^2}\int_0^\infty \hat{j}_l(kr)U(r)u_l(r)\mathrm{d}r. \quad (29а)$$

ФУНКЦИЯ ЙОСТА

Введение функции Йоста [21] серьезно продвинуло изучение аналитических свойств S-матрицы и парциальных амплитуд рассеяния. Ниже конспективно приводятся соответствующие факты.

Рассмотренные выше радиальные волновые функции $u_l(r)$ (на самом деле они зависят от параметра k: $u_l(r) = u_{l,k}(r)$) подчинялись следующим краевым условиям [10, с. 233] в нуле:

$$u_{l,k}(r)\underset{r\to 0}{\to}\mathrm{const}\times\hat{\mathrm{j}}_l(kr), \quad (30)$$

что не противоречит (19), и при $r\to\infty$

$$u_{l,k}(r)\underset{r\to\infty}{\to}\hat{\mathrm{j}}_l(kr) + kf_l\widehat{\mathrm{h}}_l^{(1)}(kr). \quad (31)$$

Функция $u_{l,k}(r)$ в этом случае подчиняется условию нормировки [10, с. 233]

$$\int_0^\infty u_{l,k}(r)u_{l,k'}(r)^*\mathrm{d}r = \frac{\pi}{2}\delta(k'-k).$$

Однако, максимально плодотворным для изучения задач рассеяния стало введение другого решения уравнения (18) $\varphi_l(k,r)$, называемого регулярным. Для этой функции вводится единственное граничное условие

$$\varphi_l(k,r)\underset{r\to 0}{\to}\hat{\mathrm{j}}_l(kr), \quad (32)$$

т. е. асимптотически при $r\to 0$ две эти функции совпадают. Таким образом, одновременно с выполнением условия (19) в (32) осуществляется и нормировка решения $\varphi_l(k,r)$. Регулярное решение является вещественным вследствие вещественности уравнения (18) и краевого условия (32). При этом ясно (см. (30)), что функция $\varphi_l(k,r)$ с точностью комплексного множителя пропорциональна решению $u_{l,k}(r)$, рассмотренному выше. При $r\to\infty$ функция $\varphi_l(k,r)$ должна приближаться к некоторой комбинации решений свободного радиального уравнения (21), например к комбинации $a\widehat{\mathrm{h}}_l^{(1)} + b\widehat{\mathrm{h}}_l^{(2)}$. С учетом вещественности функции $\varphi_l(k,r)$ выбирают такое представление [10, с. 243]:

$$\varphi_l(k,r)\underset{r\to\infty}{\to}\frac{i}{2}\left(\mathrm{f}_l(k)\widehat{\mathrm{h}}_l^{(2)}(kr) - \mathrm{f}_l(k)^*\widehat{\mathrm{h}}_l^{(1)}(kr)\right). \quad (33)$$

Функция $\mathrm{f}_l(k)$ называется функцией Йоста.

Выражение (22) с учетом соотношения $\hat{\mathrm{j}}_l = \left(\mathrm{h}_l^{(1)} - \mathrm{h}_l^{(2)}\right)/2i$ и выражения (24) приводится к виду

$$u_{l,k}(r)\underset{r\to\infty}{\to}\frac{\hat{i}}{2}\left(\widehat{\mathrm{h}}_l^{(2)}(kr) - S_l\widehat{\mathrm{h}}_l^{(1)}(kr)\right). \quad (34)$$

Сравнение (33) и (34) дает

$$S_l = \frac{\mathrm{f}_l(k)^*}{\mathrm{f}_l(k)}, \quad (35)$$

$$\varphi_l(k,r) = \mathrm{f}_l(k)u_{l,k}(r). \quad (36)$$

Из (35) и соотношения $S_l = e^{2i\delta_l}$ сразу следует

$$\mathrm{f}_l(k) = \left|\mathrm{f}_l(k)\right| e^{-i\delta_l}\,. \qquad (37)$$

Если принять, что в (18) потенциал умножен на число λ, характеризующее силу взаимодействия — $\lambda U(r)$, то имеет место следующее соотношение [10, с. 244]:

$$\mathrm{f}_l(k) = 1 + \frac{\lambda}{k}\int\limits_0^\infty \widehat{\mathrm{h}}_l^{(1)}(kr)U(r)\varphi_l(k,r)\mathrm{d}r\,. \qquad (38)$$

Отсюда следует важный результат: функция Йоста при переходе к пределам $\lambda \to 0$ (слабое взаимодействие) или $k \to \infty$ стремится к значению $\mathrm{f}_l(k) = 1$, соответствующему случаю свободного движения. Кроме того, в рамках принятых допущений для (35) справедлива цепочка равенств

$$S_l = \frac{f_l(k)^*}{f_l(k)} = \frac{f_l(k^*)^*}{f_l(k)} = \frac{f_l(-k)}{f_l(k)}\,. \qquad (39)$$

Замечание. В случае возможности аналитического продолжения функции $\mathrm{f}_l(k)$ с действительной полуоси $k \in [0,\infty]$ на некую область комплексной плоскости k, функция $\mathrm{f}_l(k)^*$ в общем случае не является голоморфной. Поэтому выражение (35) не позволяет судить об аналитических свойствах S_l, в то время как из определения (39) уже ясно, что она является мероморфной функцией комплексного переменного k.

Аналитические свойства функции Йоста и *S*-матрицы

Как видно из (39), аналитические свойства *S*-матрицы полностью определяются соответствующими свойствами функций Йоста, которые, как видно из (38), полностью определены свойствами регулярного решения $\varphi_l(k,r)$.

Известно, что при следующих предположениях относительно свойств потенциала (*условие* I) [10, с. 41, 226]:

- потенциал $U(r)$ действителен и непрерывен на интервале $r \in (0,\infty)$ за исключением конечного числа точек разрывов первого рода;
- $U(r) \underset{r\to\infty}{\to} O(r^{-3-\varepsilon})$ для некоторого $\varepsilon > 0$;
- $U(r) \underset{r\to 0}{\to} O(r^{-3/2+\varepsilon})$ для некоторого $\varepsilon > 0$,

— функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ аналитична в верхней полуплоскости комплексного переменного k: $\mathrm{Im}\,k > 0$. Из (39) видно, что числитель и знаменатель аналитичны соответственно в непересекающихся полуплоскостях $\mathrm{Im}\,k < 0$ и $\mathrm{Im}\,k > 0$. Поэтому для получения каких-либо выводов об аналитичности функций $S_l(k)$ ужесточают требования к поведению потенциала $U(r)$ при $r \to \infty$.

Ниже приведены случаи различных вариантов ограничения поведения потенциала [10, с. 261–264]. Так, если потенциал финитен, т. е. $U(r) \equiv 0$ начиная с $r \ge a$, то функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ аналитична при всех значениях k, т. е. является целой функцией. Это означает, что при всех k функция $S_l(k)$ — мероморфная функция. Отметим, что именно этот случай является типичным для акустической теории рассеяния.

При экспоненциальном убывании потенциала $U(r) \underset{r\to\infty}{\to} O(e^{-\mu r})$ функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ аналитична в области $\mathrm{Im}\,k > -\mu/2$, а $S_l(k)$ мероморфна в полосе $-\mu/2 < \mathrm{Im}\,k < \mu/2$.

Если потенциал представляет собой аналитическую функцию от r, то функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ является аналитической функцией на всей комплексной плоскости k за исключением, возможно, отрицательной мнимой полуоси.

Если потенциал является одновременно и аналитическим и экспоненциально убывающим, то функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ аналитична везде, кроме отрезка мнимой оси $-i\mu/2 > k > -i\infty$, вещественна на отрезке мнимой оси $-i\mu/2 < k < i\infty$. S-матрица мероморфна на всей плоскости, кроме отрезков мнимой оси $i\mu/2 < k < i\infty$ и $-i\mu/2 > k > -i\infty$.

Приведем также некоторые качественные результаты, связанные с поведением потенциала [9, с. 580–581]. Так, при скорости спада потенциала с расстоянием быстрее, чем $1/r$: $\lim\limits_{r\to\infty} U(r) = o(r^{-1})$, обеспечивается конечность фазовых сдвигов δ_l волновых функций u_l по сравнению с волновыми функциями $\hat{\mathrm{j}}_l(kr)$ для свободного движения; при скорости спада $\lim\limits_{r\to\infty} U(r) = o(r^{-2})$ обеспечивается конечность полного сечения рассеяния; наконец, для обеспечения конечности амплитуды рассеяния при нулевом угле рассеяния $\theta = 0$ необходима скорость спада $\lim\limits_{r\to\infty} U(r) = o(r^{-3})$.

Приведем еще некоторые свойства рассматриваемых функций.

- Функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ вещественна при значениях аргумента k, расположенных на мнимой оси [10, с. 259].
- Нули функций Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ располагаются на мнимой положительной полуоси переменной k и соответствуют так называемым связанным состояниям. Эти нули простые; функция $\mathrm{f}_l(-\bar{k})$, если она определена в нуле функции Йоста $k = \bar{k}$, нулю не равна. Тогда, согласно (39), эти нули $k = \bar{k}$ соответствуют полюсам функций $S_l(k)$ [10, с. 265].

- Функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ не может иметь нулей на вещественной оси за исключением, быть может, начала координат $k = 0$ [10, с. 268].
- При $k \to \infty$ в любой части полуплоскости $\mathrm{Im}\, k \geq 0$ функция Йоста $\mathrm{f}_l(k)$ стремится к единице. Отсюда следует, что существует некоторый радиус $|k| = \rho$, за которым $\mathrm{f}_l(k)$ не имеет нулей в области $\mathrm{Im}\, k \geq 0$, откуда в свою очередь следует, что количество нулей функции $\mathrm{f}_l(k)$ конечно, т. е существует конечное число связанных состояний с угловым моментом l [10, с. 269–270].
- Для любого центрального потенциала, подчиняющегося *условию* I, фазовый сдвиг $\delta_l(k)$ удовлетворяет соотношению (теорема Левинсона) [10, с. 270]

$$\delta_l(r=0) - \delta_l(r=\infty) = n_l \pi \ .$$

Здесь $\delta_l(r=\infty) = \delta_l(k)$ по определению фазового сдвига; n_l — число связанных состояний с угловым моментом l. Это соотношение выполняется всегда кроме случая, когда s — волновая функция Йоста $\mathrm{f}_0(k)$ — обращается в нуль при $k = 0$, $\mathrm{f}_0(0) = 0$; в этом случае при $l = 0$ теорема записывается так

$$\delta_0(r=0) - \delta_0(r=\infty) = \left(n_0 + 1/2\right)\pi \ .$$

РЕЗОНАНСЫ

Резонансы представляют собой, вероятно, наиболее замечательное явление во всех экспериментах по рассеянию. Встречается это явление как в квантовомеханическом, так и в волновом рассеянии, включая акустическое рассеяние (см., например, [3]). Они проявляются в появлении острых пиков в функции зависимости полного сечения рассеяния от действительного параметра k, связанного с энергией частиц в квантовой механике и представляющего волновое число в волновом рассеянии. Известно [10, с. 283], что если функция $S_l(k)$ имеет полюс в нижней полуплоскости ($\mathrm{Im}\, k < 0$), то при некоторых обстоятельствах этот полюс может соответствовать резонансу при угловом моменте l. Таким образом, для появления резонансов необходимо, чтобы функция Йоста была определена в части или всей нижней полуплоскости $\mathrm{Im}\, k < 0$, что накладывает соответствующие требования на поведение потенциала. В случае финитного потенциала это требование заведомо выполняется.

ВЫВОДЫ

В данной части I обзора отмечается идентичность постановки квантовомеханической и акустической задач рассеяния. Приводятся результаты центрального потенциального квантовомеханического рассеяния. Основное внимание уделяется описанию аналитических свойств радиальных волновых функций, функций Йоста, парциальных амплитуд рассеяния и их особенностей. Приведены уравнения для вычисления парциальных фазовых сдвигов. Рассмотрены резонансы, вызванные полюсами матрицы рассеяния, отличными от полюсов, отвечающих связанным состояниям.

Работа была выполнена при поддержке Президиума Российской академии наук, программа фундаментальных исследований Президиума РАН № 21 "Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Шарфарец Б.П.* О некоторых свойствах амплитуды рассеяния // Научное приборостроение. 2007. Т. 17, № 4. С. 55–60.
2. *Шарфарец Б.П.* О возможности эффективного вычисления амплитуды рассеяния на включении в сложном поле // Акуст. журн. 2010. Т. 56, № 2. С. 166–171.
3. *Flax L., Gaunaurd G., Überall H.* Theory of resonance scattering // Physical acoustics. Academic Press. 1981. V. 15. P. 191–294.
4. *Colton D., Kress R.* Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory. Springer, N.Y., 1998. 331 p.
5. Математическая физика. Энциклопедия / Гл. ред. Л.Д. Фаддеев. М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. 691 с.
6. *Морс Ф.М. Фешбах Г.* Методы теоретической физики. Т. 2. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1960. 860 с.
7. *Бреховских Л.М.* Волны в слоистых средах. М.: Наука, 1973. 344 с.
8. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 608 с.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Теоретическая физика. Т. 3. М.: Наука, 1974. 752 с.
10. *Тейлор Дж.* Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М.: Мир, 1975. 567 с.
11. *Ю Ву Т., Омура Т.* Квантовая теория рассеяния. М.: Наука, 1969. 452 с.
12. *Де Альфаро В., Редже Т.* Потенциальное рассеяние. М.: Мир, 1966. 275 с.
13. *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544 с.
14. *Калоджеро Ф.* Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. М.: Мир, 1972. 294 с.

15. *Ситенко А.Г.* Лекции по теории рассеяния. Киев: Вища Школа, 1971. 260 с.
16. *Мессиа А.* Квантовая механика. Т. 1. М.: Наука, 1978. 479 с. (Т. 2: 1979. 584 с.).
17. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974. 341 с.
18. *Лакс П., Филипс Р.* Теория рассеяния. М.: Мир, 1971. 312 с.
19. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 3. Теория рассеяния. М.: Мир, 1982. 443 с.
20. *Нуссенцвейг Х.М.* Причинность и дисперсионные соотношения. М.: Мир, 1976. 462 с.
21. *Helv J.R.* // Phys. Acta. 1947. V. 20. P. 256.
22. *Бартон Г.* Дисперсионные методы в теории поля. М.: Атомиздат, 1968. 391 с.
23. *Боголюбов Н.Н., Медведев Б.В., Поливанов М.К.* Вопросы теории дисперсионных соотношений. М.: ГИФМЛ, 1958. 203 с.

Институт аналитического приборостроения РАН, г. Санкт-Петербург

Контакты: : *Шарфарец Борис Пинкусович*, sharb@mail.ru

Материал поступил в редакцию 4.07.2011.

PROPERTIES OF GENERAL AND PARTIAL SCATTERING AMPLITUDES AND DISPERSION RELATIONS IN QUANTUM MECHANICS. PART I. PROPERTIES OF PARTIAL SCATTERING AMPLITUDES

B. P. Sharfarets

Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg

The desire to extrapolate the well-developed quantum mechanics scattering theory to acoustic scattering served the stimulus to write the review. Probably this can help in the solution of acoustic problems of scattering, in particular in solution of problems of acoustic radiation pressure calculation. This part of the review states the identity of both problems of scattering. The results of the central potential quantum mechanical scattering are presented. Special attention is given to the description of analytical properties of radial wave functions, Yost functions, partial scattering amplitudes and their features. The equations for the evaluation of partial phase shifts are given. Resonances caused by scattering matrix poles, distinct from the poles corresponding to the bound states are discussed.

Keywords: quantum mechanics scattering theory, wave scattering, scattering amplitude, resonance scattering