

К ТЕОРИИ УПРУГОГО РАССЕЙЯНИЯ ЧАСТИЦ

*Б. Я. Балагуров**

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 25 апреля 2018 г.

Задача об упругом рассеянии частиц рассмотрена в рамках метода квантования потенциала. Исследованы свойства собственных функций $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и собственных значений $\alpha_\nu^{(+)}$ этого метода для состояний с положительной энергией (область непрерывного спектра). В предположении полноты системы $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ дано решение поставленной задачи путем разложения искомой волновой функции по этой системе. Предлагаемый подход воспроизводит известные результаты во всех рассмотренных предельных случаях, давая, в то же время, более детальное описание амплитуды рассеяния, чем стандартная фазовая теория.

DOI: 10.1134/S0044451018090092

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория упругого рассеяния частиц, имеющая многочисленные применения, в достаточной степени развита и является важной составляющей квантовой механики. Основные результаты этой теории представлены в книгах [1–3] и других монографиях. Для амплитуды упругого рассеяния — центральной характеристики этого процесса — установлены некоторые общие свойства: соотношение унитарности, связь полюсов амплитуды с уровнями энергии в потенциале притяжения и т. д. В ряде предельных случаев найден явный вид амплитуды: при рассеянии на «слабом» потенциале (борновское приближение), при резонансном рассеянии частиц малой энергии и т. п.

Однако, несмотря на известную завершенность теории упругого рассеяния, представляет определенный интерес рассмотрение соответствующей задачи с помощью альтернативного стандартному метода, когда квантуется потенциальная энергия. Такой подход позволяет по-новому взглянуть на обсуждаемую проблему и получить дополнительную информацию об амплитуде рассеяния. Подобного типа способ квантования впервые, по-видимому, был применен в статье [4]. В этой работе потенциалу $U(\mathbf{r})$ в уравнении Шрёдингера приписывался некоторый множитель: $U(\mathbf{r}) \rightarrow \lambda U(\mathbf{r})$. В полученном таким образом модифицированном уравнении в каче-

стве объекта квантования выбиралась константа λ . Этот формальный прием использовался при решении некоторых задач для потенциала в виде трехмерного кулона.

В работах [5, 6] был предложен подход, не требующий введения вспомогательных величин в уравнение Шрёдингера. Для рассмотренных в работах [5, 6] отрицательных энергий (область связанных состояний) в качестве объекта квантования выбиралась глубина потенциальной ямы. В этом случае сама энергия E выполняла роль параметра. При таком подходе как собственные значения α_ν , так и собственные функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ вещественны и имеют реальный физический смысл. Дискретному спектру величин α_ν соответствует бесконечный набор глубин потенциальных ям, в которых имеются связанные состояния с одним и тем же уровнем энергии $E < 0$. Волновые функции таких состояний при особом (с «весом») условии нормировки образуют систему собственных функций $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$. Применение этого метода несколько упрощает решение рассмотренных в [5, 6] задач, так как при этом отпадает необходимость в привлечении системы волновых функций непрерывного спектра энергии $\{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\}$.

В настоящей статье метод работ [5, 6] переносится на область непрерывного спектра энергии ($E > 0$). В этом случае собственные значения $\alpha_\nu^{(+)}$ и собственные функции $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ становятся комплексными величинами. Тем не менее спектр собственных значений остается дискретным, а собственные функции по-прежнему составляют счетное множество. В статье рассмотрены основные свойства величин $\alpha_\nu^{(+)}$ и функций $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$. В предположении

* E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

о полноте системы $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ дано решение задачи об упругом рассеянии плоской волны на произвольном потенциале. Найдено точное формальное выражение для амплитуды рассеяния $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$, содержащее характерные для данного потенциала величины — собственные значения $\alpha_\nu^{(+)}$ и коэффициенты из асимптотик собственных функций $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$. Полученная для $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ формула удовлетворяет требованиям общего характера (условие унитарности и др.) и воспроизводит известные результаты в различных предельных случаях. Таким образом, установленное в работе общее выражение для $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ содержит в себе все предыдущие результаты и позволяет исследовать амплитуду упругого рассеяния во всем диапазоне изменения ее основных аргументов — энергии и величины потенциала.

В Приложении В метод работ [5, 6] обобщен также на область комплексных энергий E . В этом случае собственные функции и собственные значения могут быть определены при всех $\text{Im} \sqrt{E} > 0$ (или, что то же, $\text{Re} \sqrt{-E} > 0$), т. е. на всем физическом листе римановой поверхности [1]. При таком подходе величины α_ν , $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и $\alpha_\nu^{(+)}$, $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ являются предельными случаями собственных значений и собственных функций, определенных для комплексной энергии, соответственно на действительных полуосях $E < 0$ и $E > 0$. Таким образом, с другой стороны, знание величин α_ν , $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ или $\alpha_\nu^{(+)}$, $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ на этих полуосях позволяет найти собственные значения и собственные функции на всем физическом листе с помощью аналитического продолжения.

2. ОБЛАСТЬ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Приведем основные результаты метода квантования потенциала в области отрицательных энергий (см. [6]), которые понадобятся в дальнейшем.

Представим потенциальную энергию $U(\mathbf{r})$ в виде $U(\mathbf{r}) = U^0 v(\mathbf{r})$, где U^0 — величина потенциала, а функция $v(\mathbf{r})$ задает его форму. Далее ограничимся рассмотрением случая, когда $0 \leq v(\mathbf{r}) \leq 1$ и $v(\mathbf{r})$ при $r \rightarrow \infty$ достаточно быстро (например, экспоненциально) обращается в нуль. Стационарное уравнение Шредингера запишем в виде

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \varepsilon \psi(\mathbf{r}) = \alpha v(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$, $\alpha = 2mU^0/\hbar^2$.

1. В методе квантования потенциала в качестве объекта квантования выбирается величина α , так

что при отрицательной энергии для собственных функций $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ имеем следующее уравнение:

$$\nabla^2 \varphi_\nu(\mathbf{r}) + \varepsilon \varphi_\nu(\mathbf{r}) = \alpha_\nu v(\mathbf{r}) \varphi_\nu(\mathbf{r}), \quad \varepsilon = -\varkappa^2 < 0. \quad (2)$$

Здесь энергия играет роль параметра, от которого зависят как собственные значения $\alpha_\nu = \alpha_\nu(\varepsilon) < 0$, так и собственные функции $\varphi_\nu = \varphi_\nu(\varepsilon; \mathbf{r})$.

Из уравнения (2) находим асимптотическое поведение собственной функции: при $r \rightarrow \infty$ имеем $\varphi_\nu(\mathbf{r}) \propto r^{-1} \exp -\varkappa r$, где $\varkappa = \sqrt{-\varepsilon}$. Умножая (2) на комплексно сопряженную функцию $\varphi_\nu^*(\mathbf{r})$ и интегрируя по всему пространству, убеждаемся, что собственное значение α_ν — вещественно и при $\varepsilon \leq 0$ отрицательно. В этом случае собственные функции могут быть выбраны действительными, что в дальнейшем будем предполагать выполненным.

Обычным образом выясняем, что собственные функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\mu(\mathbf{r})$ ортогональны с весом $v(\mathbf{r})$, если $\alpha_\nu \neq \alpha_\mu$. Поэтому соотношение ортонормированности для системы $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ запишем в виде

$$\int \varphi_\mu(\mathbf{r}) \varphi_\nu(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}, \quad (3)$$

где функции $\varphi_\mu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ берутся при одной и той же энергии ε .

Есть основания полагать (см. [6]), что система $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ полна, так что произвольная функция $f(\mathbf{r})$ может быть разложена в ряд:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_\nu f_\nu \varphi_\nu(\mathbf{r}), \quad f_\nu = \int f(\mathbf{r}) \varphi_\nu(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (4)$$

Для того чтобы этот ряд сходил к самой функции $f(\mathbf{r})$, должно выполняться равенство

$$v(\mathbf{r}) \sum_\nu \varphi_\nu(\mathbf{r}) \varphi_\nu(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5)$$

являющееся соотношением полноты для системы собственных функций $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$. В (5) $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r}')$ берутся при одной и той же энергии ε . Соотношение (5) справедливо для тех \mathbf{r} и \mathbf{r}' , для которых $v(\mathbf{r}) \neq 0$ и $v(\mathbf{r}') \neq 0$.

Обозначим через $\tilde{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ и $\tilde{\alpha}_\nu$ собственные функции и собственные значения, отвечающие энергии $\tilde{\varepsilon}$. Тогда, как и в [6], может быть получено соотношение

$$\begin{aligned} & (\alpha_\nu - \tilde{\alpha}_\mu) \int \varphi_\nu(\mathbf{r}) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \\ & = (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}) \int \varphi_\nu(\mathbf{r}) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r}) d\mathbf{r}; \quad \tilde{\alpha}_\mu = \alpha_\mu(\tilde{\varepsilon}). \end{aligned} \quad (6)$$

Положив в (6) $\mu = \nu$, после перехода к пределу $\tilde{\varepsilon} \rightarrow \varepsilon$ получим

$$\int [\varphi_\nu(\mathbf{r})]^2 d\mathbf{r} = \frac{d\alpha_\nu}{d\varepsilon}, \quad (7)$$

откуда следует, в частности, что $d\alpha_\nu/d\varepsilon > 0$.

Введем нулевую функцию Грина

$$G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\varkappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad \varkappa = \sqrt{-\varepsilon}, \quad (8)$$

подчиняющуюся уравнению

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2 G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \varepsilon G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (9)$$

С помощью $G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ дифференциальное уравнение (2) может быть преобразовано к интегральному виду

$$\varphi_\nu(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha_\nu(\varkappa)}{4\pi} \int \frac{e^{-\varkappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_\nu(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (10)$$

Из (10) находим асимптотическое выражение для собственной функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$:

$$r \rightarrow \infty : \quad \varphi_\nu(\mathbf{r}) \approx -\frac{\alpha_\nu(\varkappa) u_\nu(\mathbf{n}, \varkappa)}{4\pi} \frac{1}{r} e^{-\varkappa r}; \quad (11)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r},$$

$$u_\nu(\mathbf{n}, \varkappa) = \int e^{\varkappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'} \varphi_\nu(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (12)$$

Заметим, что сравнение (12) с (4) показывает, что величины $u_\nu(\mathbf{n}, \varkappa)$ являются коэффициентами разложения по системе $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$ функции $f(\mathbf{r}') = \exp(\varkappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}')$:

$$e^{\varkappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\nu} u_\nu(\mathbf{n}, \varkappa) \varphi_\nu(\mathbf{r}), \quad (13)$$

где функция $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ берется при $\varepsilon = -\varkappa^2$.

Задача о связанном состоянии частицы в потенциале $\alpha v(\mathbf{r})$ (где $\alpha < 0$) решается с помощью разложения искомой волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ по системе собственных функций данного потенциала $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$. В результате для определения уровня энергии $\varepsilon_\nu = \varepsilon_\nu(\alpha)$ получаем уравнение

$$\alpha_\nu(\varepsilon) = \alpha, \quad (14)$$

которое может иметь вещественные решения только при $\alpha < 0$. Волновая функция $\psi_\nu(\mathbf{r})$ связанного состояния с энергией ε_ν выражается через $\varphi_\nu(\varepsilon; \mathbf{r})$ следующим образом:

$$\psi_\nu(\mathbf{r}) = C_\nu \varphi_\nu(\varepsilon; \mathbf{r}) \Big|_{\varepsilon = \varepsilon_\nu}, \quad (15)$$

$$C_\nu = \left(\left[\frac{d\alpha_\nu}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon = \varepsilon_\nu} \right)^{-1/2} = \left[\frac{d\varepsilon_\nu(\alpha)}{d\alpha} \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Коэффициент C_ν определен из соотношения (7).

При $r \rightarrow \infty$ из (16) и (11) находим асимптотическое выражение для волновой функции связанного состояния

$$r \rightarrow \infty : \quad \psi_\nu(\mathbf{r}) \approx A_\nu(\mathbf{n}) \frac{e^{-\varkappa_\nu r}}{r}, \quad (17)$$

$$A_\nu(\mathbf{n}) = -C_\nu \left[\frac{\alpha_\nu(\varkappa) u_\nu(\mathbf{n}, \varkappa)}{4\pi} \right]_{\varepsilon = \varepsilon_\nu}. \quad (18)$$

Отметим, что в силу равенств (6) и (7) для волновых функций связанных состояний (15), (16) выполняется соотношение ортонормированности в «нормальном» виде:

$$\int \psi_\mu(\mathbf{r}) \psi_\nu(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}. \quad (19)$$

В то же время для исчезающих на бесконечности потенциалов функции $\psi_\nu(\mathbf{r})$, в отличие от системы $\{\varphi_\nu(\mathbf{r})\}$, не образуют полного набора.

При рассмотрении свойств $\alpha_\nu(\varkappa)$ и $\varphi_\nu(\varkappa; \mathbf{r})$ при малых \varkappa ($\varkappa a \ll 1$, где a — эффективный радиус действия потенциала) в качестве базиса выбираем состояния с нулевой энергией. Соответствующие собственные функции $\zeta_\nu(\mathbf{r}) = \varphi_\nu(0; \mathbf{r})$ удовлетворяют уравнению

$$\nabla^2 \zeta_\nu(\mathbf{r}) = \lambda_\nu v(\mathbf{r}) \zeta_\nu(\mathbf{r}), \quad (20)$$

где $\lambda_\nu = \alpha_\nu(0)$. Величины λ_ν и $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ вещественны, причем $\lambda_\nu < 0$. Функции $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ образуют ортонормированную полную систему. Соотношения ортонормированности и полноты для $\{\zeta_\nu(\mathbf{r})\}$ по форме совпадают с (3) и (5).

Интегральное уравнение для $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ следует в пределе $\varkappa \rightarrow 0$ из равенства (10):

$$\zeta_\nu(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda_\nu}{4\pi} \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \zeta_\nu(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (21)$$

Если $v(\mathbf{r})$ достаточно быстро убывает с ростом r , то из уравнения (21) следует, что асимптотика функции $\zeta_\nu(\mathbf{r})$ имеет «электростатический» вид

$$r \rightarrow \infty : \quad \zeta_\nu(\mathbf{r}) \approx \frac{Q_\nu}{r} + \frac{(\mathbf{r} \mathbf{d}_\nu)}{r^3} + \dots \quad (22)$$

Здесь Q_ν , \mathbf{d}_ν, \dots — аналоги электростатических зарядов, дипольного момента и т. д.

При малых \varkappa для состояния, имеющего при $\varkappa = 0$ монополющую асимптотику («s-состояние»), собственная функция имеет вид

$$r \gg a : \quad \varphi_{s\nu}(\mathbf{r}) \approx Q_\nu \frac{e^{-\varkappa r}}{r}. \quad (23)$$

Для вычисления линейной по \varkappa поправки к $\lambda_{s\nu}$ воспользуемся формулой (7). В результате получаем

$$\alpha_{s\nu}(\varkappa) = \lambda_{s\nu} - \varkappa \cdot 4\pi Q_\nu^2 + \dots \quad (24)$$

Из сравнения (23) с асимптотикой (11) находим

$$u_{s\nu}^{(0)} = -\frac{4\pi Q_\nu}{\lambda_{s\nu}}, \quad (25)$$

где $u_{s\nu}^{(0)} = u_{s\nu}(\mathbf{n}, 0)$.

Подставив (24) в уравнение (14), для соответствующего уровня энергии связанного состояния получим следующее выражение:

$$\varepsilon_{s\nu} = -\varkappa_{s\nu}^2, \quad \varkappa_{s\nu} = \frac{\lambda_{s\nu} - \alpha}{4\pi Q_\nu^2}. \quad (26)$$

Уровень (26) является действительным при $|\alpha| > |\lambda_{s\nu}|$.

2. Для центрально-симметричных потенциалов функция $v(\mathbf{r})$ зависит только от $r = |\mathbf{r}|$. В этом случае задача может быть упрощена путем отделения от собственной функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ угловой части.

Для того чтобы функция $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ при этом оставалась действительной, введем вещественные сферические функции $Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})$:

$$Y_{lm}^{(1)}(\mathbf{n}) = a_{lm} P_l^m(\cos \theta) \cos m\phi, \quad 0 \leq m \leq l, \quad (27)$$

$$Y_{lm}^{(2)}(\mathbf{n}) = a_{lm} P_l^m(\cos \theta) \sin m\phi, \quad 1 \leq m \leq l; \quad (28)$$

$$a_{lm} = \left[\frac{2l+1}{2\pi(1+\delta_{m0})} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (29)$$

Здесь $P_l^m(x)$ — присоединенные полиномы Лежандра и

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r} = \{\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta\}. \quad (30)$$

Система сферических функций $\{Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\}$ ($\lambda = 1, 2$) является ортонормированной

$$\int Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{l'm'}^{(\lambda')}(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (31)$$

где $d\mathbf{n} = do = \sin \theta d\theta d\phi$, и полной

$$\sum_{\lambda=1}^2 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') = \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}'), \quad (32)$$

$$\delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}') = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\phi - \phi'). \quad (33)$$

Отметим также, что

$$\sum_{\lambda=1}^2 \sum_{m=0}^l Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'), \quad (34)$$

где $P_l(x)$ — обычные полиномы Лежандра.

Собственную функцию $\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \varphi_{\lambda l m n}(r, \theta, \phi)$ представим в виде

$$\varphi_{\lambda l m n}(\mathbf{r}) = \varphi_{ln}(r) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}). \quad (35)$$

Подстановка (35) в (2) дает следующее уравнение для радиальной функции $\varphi_{ln}(r)$:

$$\frac{d^2 \varphi_{ln}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi_{ln}(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \varphi_{ln}(r) + \varepsilon \varphi_{ln}(r) = \alpha_{ln} v(r) \varphi_{ln}(r). \quad (36)$$

Индексом n отмечены различные решения уравнения (36) при фиксированном l . Система радиальных собственных функций $\{\varphi_{ln}(r)\}$ при фиксированном l ортонормирована

$$\int_0^\infty \varphi_{ln}(r) \varphi_{ln'}(r) v(r) r^2 dr = \delta_{nn'} \quad (37)$$

и полна

$$v(r) \sum_n \varphi_{ln}(r) \varphi_{ln}(r') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r'). \quad (38)$$

Для $G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ из (8) справедливо разложение

$$G^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_{\lambda l m} G_l^0(r, r') Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') \quad (39)$$

с парциальной нулевой функцией Грина

$$G_l^0(r, r') = -\frac{2\varkappa}{\pi} \left\{ k_l(\varkappa r) i_l(\varkappa r') \theta(r - r') + i_l(\varkappa r) k_l(\varkappa r') \theta(r' - r) \right\}. \quad (40)$$

Здесь $k_l(x)$ и $i_l(x)$ — сферические функции соответственно Макдональда и Бесселя мнимого аргумента [7]; $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$. Выражение (40) удовлетворяет уравнению

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \varkappa^2 \right\} G_l^0(r, r') = \frac{\delta(r-r')}{r^2}. \quad (41)$$

Уравнение (36) с помощью $G_l^0(r, r')$ преобразуем к интегральному виду

$$\varphi_{ln}(r) = \alpha_{ln}(\varkappa) \int_0^\infty G_l^0(r, r') \varphi_{ln}(r') v(r') (r')^2 dr'. \quad (42)$$

Поскольку

$$x \rightarrow \infty: \quad k_l(x) \approx \frac{\pi}{2x} e^{-x}, \quad i_l(x) \approx \frac{1}{2x} e^x, \quad (43)$$

из (42) следует

$$r \rightarrow \infty: \quad \varphi_{ln}(r) \approx -\frac{\alpha_{ln}(\varkappa) u_{ln}(\varkappa)}{4\pi} \frac{e^{-\varkappa r}}{r}, \quad (44)$$

$$u_{ln}(\varkappa) = 4\pi \int_0^\infty i_l(\varkappa r) \varphi_{ln}(r) v(r) r^2 dr. \quad (45)$$

Нетрудно видеть, что величина $u_{ln}/(4\pi)$ из (44), (45) является коэффициентом разложения функции $i_l(\varkappa r)$ по системе $\{\varphi_{ln}(r)\}$, так что

$$i_l(\varkappa r) = \frac{1}{4\pi} \sum_n u_{ln}(\varkappa) \varphi_{ln}(r) \quad (46)$$

с $\varphi_{ln}(r)$, взятой при $\varepsilon = -\varkappa^2$.

Положив

$$u_\nu(\mathbf{n}, \varkappa) \rightarrow u_{\lambda l m n}(\mathbf{n}, \varkappa) = u_{ln}(\varkappa) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}), \quad (47)$$

приведем выражение (13) к следующему виду:

$$e^{\varkappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' r} = \sum_{l=0}^\infty \left\{ \sum_n u_{ln}(\varkappa) \varphi_{ln}(r) \right\} \times \sum_{\lambda m} Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}'). \quad (48)$$

Согласно (46) сумма в фигурных скобках равна $4\pi i_l(\varkappa r)$, так что из (48) получаем

$$e^{\varkappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}' r} = 4\pi \sum_{l=0}^\infty i_l(\varkappa r) \sum_{\lambda m} Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}'). \quad (49)$$

Уровни энергии ε_{ln} в потенциале $\alpha v(r)$ ищутся из уравнения, аналогичного (14)

$$\alpha_{ln}(\varepsilon) = \alpha. \quad (50)$$

Для радиальной волновой функции связанного состояния $R_{ln}(r)$, определяемой согласно $\psi_\nu(\mathbf{r}) \rightarrow \psi_{\lambda l m n}(\mathbf{r}) = R_{ln}(r) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})$, получаем выражение

$$R_{ln}(r) = C_{ln} \varphi_{ln}(r) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_{ln}}, \quad (51)$$

$$C_{ln} = \left[\frac{d\varepsilon_{ln}(\alpha)}{d\alpha} \right]^{1/2},$$

из которого при $r \rightarrow \infty$ находим асимптотику этой функции

$$R_{ln}(r) \approx A_{ln} \frac{e^{-\varkappa_{ln} r}}{r}, \quad (52)$$

$$A_{ln} = -C_{ln} \left[\frac{\alpha_{ln} u_{ln}}{4\pi} \right]_{\varepsilon=\varepsilon_{ln}}.$$

Коэффициент C_{ln} в (51) определен из равенства

$$\int_0^\infty [\varphi_{ln}(r)]^2 r^2 dr = \frac{d\alpha_{ln}}{d\varepsilon}, \quad (53)$$

следующего из соотношения (7).

Для центрально-симметричного потенциала

$$Q_\nu \rightarrow Q_{100n} = Q_n Y_{00}^{(1)} = Q_n / \sqrt{4\pi},$$

так что для энергии слабосвязанного s -состояния ($l=0$) из (26) получаем выражение

$$\varepsilon_{0n} = -\varkappa_{0n}^2, \quad \varkappa_{0n} = \frac{\lambda_{0n} - \alpha}{Q_n^2}, \quad (54)$$

где $|\alpha| > |\lambda_{0n}|$.

3. ОБЛАСТЬ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА ЭНЕРГИИ

Как известно [1], при $\varepsilon = k^2 > 0$ квантования энергии не происходит и она принимает любые положительные значения. В этом случае состояния частицы описываются волновыми функциями непрерывного спектра $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, являющимися решениями задачи о рассеянии плоской волны. Совокупность $\{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\}$ вместе с волновыми функциями связанных состояний (если они есть) $\{\psi_\nu(\mathbf{r})\}$ образуют полную систему [1, 8]. При решении задач традиционными методами необходимо использовать, вообще говоря, оба типа волновых функций.

1. Альтернативный подход — квантование потенциала — может быть реализован и при $\varepsilon > 0$. В области непрерывного спектра энергии собственные функции $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$, являющиеся решениями уравнения

$$\nabla^2 \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) + \varepsilon \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) = \alpha_\nu^{(+)} v(\mathbf{r}) \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}), \quad (55)$$

$$\varepsilon = k^2 > 0,$$

по-прежнему образуют счетное множество, а собственные значения $\alpha_\nu^{(\pm)}$ дискретны. В то же время, в отличие от случая $\varepsilon < 0$, и $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\alpha_\nu^{(+)}$ при $\varepsilon > 0$ становятся комплексными величинами.

Уравнение (55) при $r \gg a$, когда можно пренебречь его правой частью, имеет два типа решений со следующим асимптотическим поведением:

$$\varphi_\nu^{(\pm)}(\mathbf{r}) \propto r^{-1} \exp(\pm ikr),$$

где $k = \sqrt{\varepsilon} > 0$. Функциям $\varphi_\nu^{(\pm)}(\mathbf{r})$ отвечают разные собственные значения $\alpha_\nu^{(\pm)}$.

Решение $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ выберем в качестве собственной функции, которой отвечает собственное значение $\alpha_\nu^{(+)}$. Как показано в Приложении В, второе решение — функция $\varphi_\nu^{(-)}(\mathbf{r})$ и соответствующее собственное значение $\alpha_\nu^{(-)}$ связаны с $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\alpha_\nu^{(+)}$ следующим образом:

$$\varphi_\nu^{(-)}(\mathbf{r}) = \varphi_\nu^{(+)*}(\mathbf{r}), \quad \alpha_\nu^{(-)} = \alpha_\nu^{(+) *}, \quad (56)$$

где звездочка означает комплексное сопряжение.

Обычным образом выясняем, что собственные функции $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r})$ ортогональны с весом $v(\mathbf{r})$, если $\alpha_\nu^{(+)} \neq \alpha_\mu^{(+)}$. Поэтому соотношение ортонормированности для системы $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ запишем в виде, аналогичном (3):

$$\int \varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r}) \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}. \quad (57)$$

Предположим далее, что система собственных функций $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ полна, так что

$$v(\mathbf{r}) \sum_\nu \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (58)$$

Здесь и в (57) обе функции берутся при одной и той же энергии $\varepsilon = k^2$. Отметим, что в равенствах (57) и (58) отсутствует комплексное сопряжение какой-либо из собственных функций.

При $\varepsilon > 0$ нулевая функция Грина $G^{0(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ отличается от (8) только заменой $\varkappa \rightarrow -ik$, так что интегральное уравнение для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \times \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (59)$$

Отсюда находим асимптотическое выражение для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$:

$$r \rightarrow \infty: \quad \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \approx -\frac{\alpha_\nu^{(+)}(k) u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k) e^{ikr}}{4\pi r}, \quad (60)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r},$$

$$u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k) = \int e^{-ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'} \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (61)$$

Величины $u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k)$ являются коэффициентами разложения по системе $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ функции $f(\mathbf{r}) = \exp(ik\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})$:

$$e^{ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_\nu u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k) \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}), \quad (62)$$

где функция $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ берется при $\varepsilon = k^2$, а \mathbf{n} — произвольный единичный вектор.

Применим к уравнению (55) для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ операцию комплексного сопряжения и заменим индекс ν на μ :

$$\nabla^2 \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}) + \varepsilon \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}) = \alpha_\mu^{(+)*} v(\mathbf{r}) \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}), \quad \varepsilon = k^2. \quad (63)$$

Умножив это равенство на $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$, вычтем его из уравнения (55) для $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$, умноженного на $\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})$, и проинтегрируем по всему пространству. В результате получим соотношение

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ r^2 \int \left[\varphi_\mu^{(+)*} \frac{\partial \varphi_\nu^{(+)}}{\partial r} - \varphi_\nu^{(+)} \frac{\partial \varphi_\mu^{(+)*}}{\partial r} \right] d\mathbf{n} \right\} = (\alpha_\nu^{(+)} - \alpha_\mu^{(+)*}) \int \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (64)$$

в левой части которого интеграл преобразован в поверхностный по сфере радиуса $r \rightarrow \infty$. Используя для вычисления этого интеграла асимптотику (60), найдем соотношение

$$\frac{ik}{2\pi} \int u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k) u_\mu^{(+)*}(\mathbf{n}, k) \frac{d\mathbf{n}}{4\pi} = \frac{\alpha_\nu^{(+)} - \alpha_\mu^{(+)*}}{\alpha_\nu^{(+)} \alpha_\mu^{(+)*}} \int \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (65)$$

Из (65) при $\mu = \nu$ следует

$$\text{Im } \alpha_\nu^{(+)}(k) = \frac{k}{4\pi} \left| \alpha_\nu^{(+)}(k) \right|^2 \overline{\left| u_\nu^{(+)} \right|^2} \times \left[\int \left| \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \right|^2 v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right]^{-1}, \quad (66)$$

$$\overline{\left| u_\nu^{(+)} \right|^2} = \int \left| u_\nu^{(+)}(\mathbf{n}, k) \right|^2 \frac{d\mathbf{n}}{4\pi}. \quad (67)$$

Согласно (66), $\text{Im } \alpha_\nu^{(+)}(k) > 0$ при рассматриваемых $v(\mathbf{r}) > 0$ и $k = \sqrt{\varepsilon} > 0$.

Для s -состояний с малой энергией ($ka \ll 1$) аналогично (23)–(25) имеем

$$r \gg a : \varphi_{s\nu}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx Q_\nu \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (68)$$

$$\alpha_{s\nu}^{(+)}(k) = \lambda_{s\nu} + ik 4\pi Q_\nu^2 + \dots, \quad (69)$$

$$u_{s\nu}^{(+)}(\mathbf{n}, k) \approx u_{s\nu}(\mathbf{n}, 0) = -\frac{4\pi Q_\nu}{\lambda_{s\nu}}. \quad (70)$$

2. В случае центрально-симметричных потенциалов

$$\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \rightarrow \varphi_{\lambda l m n}^{(+)}(\mathbf{r}) = \varphi_{ln}^{(+)}(r) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}),$$

где радиальная функция $\varphi_{ln}^{(+)}(r)$ (с собственным значением $\alpha_{ln}^{(+)}(k)$) является решением уравнения вида (36) с $\varepsilon = k^2$. Из равенств (57) и (58) для системы $\{\varphi_{ln}^{(+)}(r)\}$ следуют соотношения ортонормированности

$$\int_0^\infty \varphi_{ln}^{(+)}(r) \varphi_{l'n'}^{(+)}(r) v(r) r^2 dr = \delta_{nn'} \quad (71)$$

и полноты

$$v(r) \sum_n \varphi_{ln}^{(+)}(r) \varphi_{ln}^{(+)}(r') = \frac{\delta(r-r')}{r^2}, \quad (72)$$

справедливые при каждом фиксированном l .

Для парциальной нулевой функции Грина $G_l^{0(+)}(r, r')$ при $\varepsilon = k^2 > 0$ имеем следующее выражение:

$$G_l^{0(+)}(r, r') = -ik \left\{ h_l^{(1)}(kr) j_l(kr') \theta(r-r') + j_l(kr) h_l^{(1)}(kr') \theta(r'-r) \right\}, \quad (73)$$

где $j_l(x)$ и $h_l^{(1)}(x)$ — сферические функции Бесселя и Ханкеля (первого рода). Интегральное уравнение для радиальной собственной функции $\varphi_{ln}^{(+)}(r)$ имеет вид

$$\varphi_{ln}^{(+)}(r) = \alpha_{ln}^{(+)}(k) \times \int_0^\infty G_l^{0(+)}(r, r') \varphi_{ln}^{(+)}(r') v(r') (r')^2 dr' \quad (74)$$

с $G_l^{0(+)}(r, r')$ из (73). Поскольку

$$x \rightarrow \infty : h_l^{(1)}(x) \approx (-i)^{l+1} \frac{e^{ix}}{x}, \quad (75)$$

из (74) следует

$$r \rightarrow \infty : \varphi_{ln}^{(+)}(r) \approx -\frac{\alpha_{ln}^{(+)}(k) u_{ln}^{(+)}(k) e^{ikr}}{4\pi r}, \quad (76)$$

$$u_{ln}^{(+)}(k) = (-i)^l 4\pi \int_0^\infty j_l(kr) \varphi_{ln}^{(+)}(r) v(r) r^2 dr, \quad (77)$$

так что имеет место разложение

$$j_l(kr) = \frac{i^l}{4\pi} \sum_n u_{ln}^{(+)}(k) \varphi_{ln}^{(+)}(r). \quad (78)$$

Подстановка $u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k) \rightarrow u_{ln}^{(+)}(k) Y_{lm}^{(\lambda)}(-\mathbf{n})$ в общую формулу (62) дает

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\lambda lm} \left[\sum_n u_{ln}^{(+)}(k) \varphi_{ln}^{(+)}(r) \right] \times Y_{lm}^{(\lambda)}(-\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m}), \quad (79)$$

где $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$. Здесь, согласно (78), выражение в квадратных скобках равно $(-i)^l 4\pi j_l(kr)$, так что разложение (79) с учетом $Y_{lm}^{(\lambda)}(-\mathbf{n}) = (-1)^l Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})$ принимает вид

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\lambda lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m}) \quad (80)$$

или, после суммирования по λ и m ,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^\infty i^l j_l(kr) (2l+1) P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}). \quad (81)$$

Равенство (81) представляет собой известное разложение плоской волны [1].

Поскольку при $x \rightarrow \infty$

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x} \sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right) = (-i)^l \frac{e^{ix} - (-1)^l e^{-ix}}{2ix}, \quad (82)$$

из разложения (80) получаем следующее асимптотическое выражение для плоской волны [8]:

$$r \rightarrow \infty : e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx \frac{2\pi i}{kr} \times \left\{ e^{-ikr} \delta(\mathbf{n}+\mathbf{m}) - e^{ikr} \delta(\mathbf{n}-\mathbf{m}) \right\}. \quad (83)$$

При выводе асимптотики (83) использовано соотношение полноты (32) для системы $\{Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\}$.

В случае малых энергий ($k \rightarrow 0$) из (69) и (70) следует

$$\alpha_{0n}^{(+)}(k) = \lambda_{0n} + ik Q_n^2 + \dots, \quad u_{0n}^{(+)} \approx -\frac{4\pi Q_n}{\lambda_{0n}}. \quad (84)$$

При $l \geq 1$ согласно [9] имеем ($k \rightarrow 0$)

$$\alpha_{ln}^{(+)}(k) = \lambda_{ln} + k^2 \beta_{ln}^{(2)} + \dots + ik^{2l+1} \times \left\{ \left[\frac{b_{ln}}{(2l-1)!!} \right]^2 + \dots \right\}, \quad (85)$$

$$u_{ln}^{(+)}(k) \approx -\frac{4\pi}{\lambda_{ln}} \frac{(-ik)^l}{(2l-1)!!} b_{ln}. \quad (86)$$

Здесь и в (85) b_{ln} — константа, входящая в асимптотику собственной функции при нулевой энергии:

$$r \rightarrow \infty: \quad \zeta_{ln}(r) \approx \frac{b_{ln}}{r^{l+1}}, \quad (87)$$

причем $b_{0n} = Q_n$. Коэффициент $\beta_{ln}^{(2)}$ из (85) выражается через интеграл

$$\beta_{ln}^{(2)} = \int_0^\infty [\zeta_{ln}(r)]^2 r^2 dr, \quad (88)$$

сходящийся при $l \geq 1$.

4. АМПЛИТУДА РАССЕЙНИЯ

В задаче об упругом рассеянии плоской волны $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ на потенциале $\alpha v(\mathbf{r})$ необходимо найти решение уравнения (1) (при энергии $\varepsilon = k^2$) — функцию $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, обладающую следующей асимптотикой:

$$r \rightarrow \infty: \quad \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (89)$$

Здесь $f(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ — амплитуда упругого рассеяния, $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ и $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$.

1. Положим

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \varphi(\mathbf{r}), \quad (90)$$

где функция $\varphi(\mathbf{r})$ описывает рассеянную волну. Подстановка (90) в (1) приводит к неоднородному уравнению для $\varphi(\mathbf{r})$:

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + k^2 \varphi(\mathbf{r}) - \alpha v(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) = \alpha v(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (91)$$

Величину $\varphi(\mathbf{r})$ ищем в виде разложения по системе собственных функций $\{\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\}$ данного потенциала

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_\mu \Phi_\mu \varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r}). \quad (92)$$

Подстановка (92) в уравнение (91) дает

$$\sum_\mu \Phi_\mu \left(\alpha_\mu^{(+)}(k) - \alpha \right) v(\mathbf{r}) \varphi_\mu^{(+)}(\mathbf{r}) = \alpha v(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (93)$$

Умножив равенство (93) на $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и проинтегрировав по всему пространству, определим коэффициент Φ_ν . В результате для искомой функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ получим следующее выражение:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \alpha \sum_\nu \frac{u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k)}{\alpha_\nu^{(+)}(k) - \alpha} \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}). \quad (94)$$

Здесь учтено определение (61). Находя асимптотику $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ с помощью (60) и сравнивая с (89), найдем

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi} \sum_\nu \frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)}{\alpha_\nu^{(+)}(k) - \alpha} \times u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k) u_\nu^{(+)}(\mathbf{m}, k). \quad (95)$$

Формулой (95) дается общее выражение для амплитуды упругого рассеяния.

Для центрально-симметричного потенциала функция $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ может быть разложена в ряд, аналогичный (80):

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{\lambda lm} \psi_{kl}^{(+)}(r) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m}). \quad (96)$$

Радиальная функция $\psi_{kl}^{(+)}(r)$ является решением уравнения

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \psi_{kl}^{(+)}(r) = \alpha v(r) \psi_{kl}^{(+)}(r) \quad (97)$$

с асимптотикой

$$r \rightarrow \infty: \quad \psi_{kl}^{(+)}(r) \approx i^l j_l(kr) + f_l(k) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (98)$$

где для $j_l(kr)$ следует использовать, в свою очередь, асимптотическое разложение (82). В (98) $f_l(k)$ — парциальная амплитуда упругого рассеяния, связанная с $f(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ следующим образом:

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = 4\pi \sum_{\lambda lm} f_l(k) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}) Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m}), \quad (99)$$

так что из (95) получаем

$$f_l(k) = (-1)^{l+1} \frac{\alpha}{(4\pi)^2} \times \sum_n \frac{\alpha_{ln}^{(+)}(k)}{\alpha_{ln}^{(+)}(k) - \alpha} [u_{ln}^{(+)}(k)]^2. \quad (100)$$

2. Заметим, что амплитуда рассеяния, даваемая формулой (95), очевидным образом удовлетворяет теореме взаимности [1]

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = f(-\mathbf{m}, -\mathbf{n}). \quad (101)$$

Кроме того, для величины $f(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ должно выполняться соотношение унитарности [1]

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) - f^*(\mathbf{m}, \mathbf{n}) = \frac{ik}{2\pi} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{l}) f^*(\mathbf{m}, \mathbf{l}) d\mathbf{l}. \quad (102)$$

В Приложении А показано, что выражение (95) удовлетворяет и этому равенству.

Для выяснения свойств $f(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ при комплексной энергии $\varepsilon = q^2$ (где $q = k + i\kappa$) рассмотрим величину

$$\bar{f}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi} \times \sum_{\nu} \frac{\bar{\alpha}_{\nu}(q)}{\bar{\alpha}_{\nu}(q) - \alpha} \bar{u}_{\nu}(-\mathbf{n}, q) \bar{u}_{\nu}(\mathbf{m}, q), \quad (103)$$

являющуюся, согласно Приложению В, аналитическим продолжением амплитуды рассеяния (95) на полуплоскость $\text{Im } q > 0$ или на физический лист соответствующей римановой поверхности [1]. С математической точки зрения выражение (103) представляет собой разложение $\bar{f}(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ как функции аргумента α на простые дроби. В каждом слагаемом из (103) имеется простой полюс при $\alpha = \bar{\alpha}_{\nu}(q)$, где $\bar{\alpha}_{\nu}(q)$ является, вообще говоря, комплексной величиной.

Полюсы в амплитуде (103) приобретают физический смысл при отрицательной энергии $\varepsilon = -\kappa^2 < 0$. В этом случае собственные значения $\bar{\alpha}_{\nu}(i\kappa) = \alpha_{\nu}(\kappa) < 0$ вещественны и уравнение $\alpha_{\nu}(\kappa) = \alpha$ при $\alpha < 0$ может иметь решения $\kappa = \kappa_{\nu}$, чему отвечают уровни энергии связанных состояний $\varepsilon_{\nu} = -\kappa_{\nu}^2$.

При $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{\nu}$ из формулы (103) следует

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{\nu} : \bar{f}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \approx -4\pi \frac{A_{\nu}(-\mathbf{n}) A_{\nu}(\mathbf{m})}{\varepsilon - \varepsilon_{\nu}}. \quad (104)$$

Здесь $A_{\nu}(\mathbf{n})$ — коэффициент в асимптотике (17) волновой функции $\psi_{\nu}(\mathbf{r})$ связанного состояния с энергией ε_{ν} .

Аналитическое продолжение парциальной амплитуды (100) в комплексную плоскость энергии имеет вид

$$\bar{f}_l(q) = (-1)^{l+1} \frac{\alpha}{(4\pi)^2} \sum_n \frac{\alpha_{ln}(q)}{\alpha_{ln}(q) - \alpha} [u_{ln}(q)]^2. \quad (105)$$

Это выражение, как и должно быть [1], имеет на физическом листе $\text{Im } \sqrt{\varepsilon} > 0$ простые полюсы при энергиях связанных состояний (если они есть в данном потенциале) $\varepsilon_{ln} = -\kappa_{ln}^2 < 0$, где κ_{ln} является решением уравнения $\alpha_{ln}(\kappa) = \alpha$. При $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{ln}$ главный член в величине \bar{f}_l имеет следующий вид:

$$\bar{f}_l \approx (-1)^{l+1} \frac{(A_{ln})^2}{\varepsilon - \varepsilon_{ln}} = (-1)^{l+1} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(A_{ln})^2}{E - E_{ln}}, \quad (106)$$

что согласуется с [1]. Здесь A_{ln} — коэффициент в асимптотике (52) радиальной волновой функции связанного состояния с энергией ε_{ln} .

В пределе $k \rightarrow 0$ ненулевой вклад в $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ дают только «s-состояния», так что из (95) с учетом (69), (70) получаем [6]

$$k = 0 : f^{(0)}(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -4\pi\alpha \sum_{\nu} \frac{Q_{\nu}^2}{\lambda_{s\nu}(\lambda_{s\nu} - \alpha)}. \quad (107)$$

Для центрально-симметричных потенциалов из общего выражения (100) следует

$$k = 0 : f_0(0) = -\alpha \sum_n \frac{Q_n^2}{\lambda_{0n}(\lambda_{0n} - \alpha)}. \quad (108)$$

Формулы (107) и (108) дают точные выражения для амплитуды рассеяния в пределе $k \rightarrow 0$.

Для потенциала притяжения ($\alpha < 0$) величина f при изменении α проходит через ряд «резонансов» при критических значениях глубины потенциальной ямы $\alpha = \lambda_{s\nu}$ (или $\alpha = \lambda_{0n}$), отвечающих случаям, когда появляются (или исчезают) связанные состояния с нулевой энергией. При $\alpha \approx \lambda_{s\nu}$ и малых k следует учесть линейную по k поправку в величине $\alpha_{\nu}^{(+)}(k)$ — см. (69). В результате для главного члена в амплитуде рассеяния получаем

$$f_s(\mathbf{n}, \mathbf{m}) \approx -\frac{1}{\kappa_{s\nu} + ik}, \quad \kappa_{s\nu} = \frac{\lambda_{s\nu} - \alpha}{4\pi Q_{\nu}^2}. \quad (109)$$

Если $|\alpha| > |\lambda_{s\nu}|$ (при этом $\kappa_{snu} > 0$), то в потенциале $\alpha v(\mathbf{r})$ имеется реальный уровень с энергией $\varepsilon_{s\nu} = -(\kappa_{s\nu})^2$ и, как и в центрально-симметричном случае [1], амплитуда рассеяния имеет полюс на физическом листе ($\text{Im } \sqrt{\varepsilon} > 0$). Если же $|\alpha| < |\lambda_{s\nu}|$ ($\kappa_{s\nu} < 0$), то имеется виртуальный уровень и полюс расположен на нефизическом листе.

В случае центрально-симметричных потенциалов при $\alpha \approx \lambda_{0n}$ и малых k из общей формулы (100) с учетом (84) для амплитуды s-рассеяния следует выражение

$$f_0(k) \approx -\frac{1}{\kappa_{0n} + ik}, \quad \kappa_{0n} = \frac{\lambda_{0n} - \alpha}{Q_n^2}, \quad (110)$$

которое по форме совпадает с [1], с тем, однако, отличаем, что для феноменологической (в [1]) константы \varkappa_{0n} получено явное выражение через величины, характерные для данного потенциала.

При малых k для вклада в амплитуду рассеяния состояний с $l \geq 1$ из выражения (100) с учетом (85), (86) находим ($\varepsilon = k^2$)

$$f_l(k) \approx - \left[B_{ln} \frac{-\epsilon_{ln} + \varepsilon}{\varepsilon^l} + ik \right]^{-1}, \quad (111)$$

$$\epsilon_{ln} = \frac{\alpha - \lambda_{ln}}{\beta_{ln}^{(2)}}, \quad B_{ln} = \beta_{ln}^{(2)} \left[\frac{(2l-1)!!}{b_{ln}} \right]^2. \quad (112)$$

Здесь величина ϵ_{ln} при $|\alpha| > |\lambda_{ln}|$ является уровнем энергии связанного состояния (при $l \neq 0$). Выражение (111) для $f_l(k)$ функционально совпадает с соответствующей формулой из [1] (см. § 133). При этом для введенных в [1] феноменологических констант (ϵ_{ln} и B_{ln} в обозначениях настоящей статьи) найдены явные выражения.

При малых $|\alpha|$ ($|\alpha| \ll |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$) из (95) следует разложение

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi} \sum_\nu u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n}, k) u_\nu^{(+)}(\mathbf{m}, k) \times \left\{ 1 + \frac{\alpha}{\alpha_\nu^{(+)}(k)} + \left[\frac{\alpha}{\alpha_\nu^{(+)}(k)} \right]^2 + \dots \right\}. \quad (113)$$

Для линейного по α члена разложения (113) (борновское приближение) с учетом определения (61) имеем

$$f_B(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi} \iint v(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \times \exp(ik\mathbf{n} \cdot \mathbf{r} - ik\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}') \times \left[v(\mathbf{r}) \sum_\nu \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}') \right]. \quad (114)$$

Здесь, согласно (58), выражение в квадратных скобках равно $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, так что из (114) получаем

$$f_B(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi} v(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad (115)$$

где $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$, $\mathbf{k}' = k\mathbf{m}$ и $v(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ — фурье-образ функции $v(\mathbf{r})$. В обычных единицах выражение (115) принимает вид

$$f_B(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} U(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), \quad (116)$$

совпадающий с [1].

Условием применимости борновского приближения (116) является $|\alpha| \ll |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$. При $ka \ll 1$ величина

$$|\alpha_\nu^{(+)}(k)| \approx |\alpha_\nu^{(+)}(0)| = |\lambda_\nu| \sim 1/a^2,$$

так что приближение (116) справедливо при $|\alpha|a^2 \ll \ll 1$ или, в обычных единицах, $|U^0| \ll \hbar^2/ma^2$. Более того, при выполнении этого условия формула Борна применима при любой энергии, так как $|\lambda_\nu| < |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$ для всех $k > 0$. В то же время при $ka \gg 1$ условие применимости борновского приближения становится менее жестким и зависит от поведения $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ при больших энергиях. Для модельного потенциала, принимающего конечное значение U^0 при $r = 0$, величина $\alpha_\nu^{(+)}(k) \approx k^2$ (см. формулу (63) из работы [6] с заменой $\varkappa \rightarrow -ik$), так что критерию $|\alpha| \ll |\alpha_\nu^{(+)}(k)|$ отвечает $|\alpha| \ll k^2$ или $|U^0| \ll E$. Если же при $r \rightarrow 0$ потенциал имеет кулоновский вид $U(\mathbf{r}) \approx \gamma/r$, где $\gamma \sim aU^0$, то $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ линейно зависит от k при $ka \gg 1$: $\alpha_\nu^{(+)}(k) \sim ik/a$ — см. Приложение В из книги [9] с заменой $\varkappa \rightarrow -ik/a$. В этом случае условием применимости борновского приближения является, как и в [1], $|U^0| \ll (\hbar^2/ma^2)ka$.

Таким образом, общие формулы (95) и (100) во всех рассмотренных предельных случаях воспроизводят известные результаты, давая, в то же время, более детальное описание амплитуды упругого рассеяния, чем стандартная фазовая теория [1].

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Для проверки выполнения соотношения унитарности подставим в правую часть равенства (102) выражение (95):

$$\frac{ik}{2\pi} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{l}) f^*(\mathbf{m}, \mathbf{l}) d\mathbf{l} = \frac{\alpha^2}{4\pi} \times \sum_\nu \sum_\mu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu - \alpha} \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^* - \alpha} u_\nu(-\mathbf{n}, k) u_\mu^*(-\mathbf{m}, k) \times \frac{ik}{2\pi} \int u_\nu(\mathbf{l}, k) u_\mu^*(\mathbf{l}, k) \frac{d\mathbf{l}}{4\pi}. \quad (A.1)$$

Здесь и далее в этом Приложении для упрощения и без того довольно громоздких формул опускаем значок «плюс» у величин $\alpha_\nu^{(+)}$, $\alpha_\mu^{(+)*}$ и $u_\nu^{(+)}$, $u_\mu^{(+)*}$, а также у $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})$.

Преобразовав интеграл от произведения $u_\nu(\mathbf{l}, k) u_\mu^*(\mathbf{l}, k)$ с помощью равенства (65), приведем (A.1) к виду

$$\begin{aligned} & \frac{ik}{2\pi} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{l}) f^*(\mathbf{m}, \mathbf{l}) d\mathbf{l} = \\ & = \frac{\alpha}{4\pi} \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \left\{ \sum_\mu \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^* - \alpha} u_\mu^*(-\mathbf{m}, k) \varphi_\mu^*(\mathbf{r}) \times \right. \\ & \times \sum_\nu u_\nu(-\mathbf{n}, k) \varphi_\nu(\mathbf{r}) - \sum_\nu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu - \alpha} u_\nu(-\mathbf{n}, k) \varphi_\nu(\mathbf{r}) \times \\ & \left. \times \sum_\mu u_\mu^*(-\mathbf{m}, k) \varphi_\mu^*(\mathbf{r}) \right\}. \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

При выводе (A.2) использовано тождество

$$\begin{aligned} \alpha \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu - \alpha} \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^* - \alpha} &= \frac{\alpha_\nu \alpha_\mu^*}{\alpha_\nu - \alpha_\mu^*} \times \\ & \times \left[\frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^* - \alpha} - \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu - \alpha} \right]. \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

Согласно (62),

$$\sum_\nu u_\nu(-\mathbf{n}, k) \varphi_\nu(\mathbf{r}) = e^{ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{A.4})$$

$$\sum_\mu u_\mu^*(-\mathbf{m}, k) \varphi_\mu^*(\mathbf{r}) = e^{-ik\mathbf{m}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{A.5})$$

так что из (A.2) находим

$$\begin{aligned} & \frac{ik}{2\pi} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{l}) f^*(\mathbf{m}, \mathbf{l}) d\mathbf{l} = \\ & = \frac{\alpha}{4\pi} \left\{ \sum_\mu \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^* - \alpha} u_\mu^*(-\mathbf{m}, k) \times \right. \\ & \times \int e^{ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} \varphi_\mu^*(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \sum_\nu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu - \alpha} u_\nu(-\mathbf{n}, k) \times \\ & \left. \times \int e^{-ik\mathbf{m}\cdot\mathbf{r}} \varphi_\nu(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right\}. \quad (\text{A.6}) \end{aligned}$$

При учете определения (61) интегралы в правой части (A.6) оказываются равными соответственно $u_\mu^*(\mathbf{n}, k)$ и $u_\nu(\mathbf{m}, k)$, так что

$$\begin{aligned} & \frac{ik}{2\pi} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{l}) f^*(\mathbf{m}, \mathbf{l}) d\mathbf{l} = \\ & = \frac{\alpha}{4\pi} \left\{ \sum_\mu \frac{\alpha_\mu^*}{\alpha_\mu^* - \alpha} u_\mu^*(-\mathbf{m}, k) u_\mu^*(\mathbf{n}, k) - \right. \\ & \left. - \sum_\nu \frac{\alpha_\nu}{\alpha_\nu - \alpha} u_\nu(-\mathbf{n}, k) u_\nu(\mathbf{m}, k) \right\} = \\ & = f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) - f^*(\mathbf{m}, \mathbf{n}). \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

Таким образом, выражение (95) для амплитуды рассеяния удовлетворяет условию унитарности (102).

ПРИЛОЖЕНИЕ В

1. При исследовании аналитических свойств амплитуды упругого рассеяния (см. [1]) и в некоторых других случаях возникает необходимость в рассмотрении свойств собственных функций при комплексных значениях энергии

$$\varepsilon(q) = q^2, \quad q = k + i\kappa. \quad (\text{B.1})$$

Для собственной функции $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ (величины, относящиеся к комплексной энергии, будем снабжать черточкой сверху) имеем уравнение

$$\nabla^2 \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) + q^2 \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) = \bar{\alpha}_\nu v(\mathbf{r}) \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}), \quad (\text{B.2})$$

где $\bar{\varphi}_\nu = \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})$ и $\bar{\alpha}_\nu = \bar{\alpha}_\nu(q)$. В качестве собственных функций выберем решения уравнения (B.2) с асимптотикой

$$\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) \sim \frac{e^{iqr}}{r}. \quad (\text{B.3})$$

Функция с асимптотическим поведением вида (B.3) обращается в нуль в пределе $r \rightarrow \infty$ при условии

$$\text{Im } q = \kappa > 0, \quad (\text{B.4})$$

что считаем выполненным.

Для собственных функций с комплексной энергией может быть установлен ряд соотношений, по форме совпадающих с соответствующими равенствами при $\varepsilon < 0$ и $\varepsilon > 0$. Так, обычным образом убеждаемся, что функции $\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})$ и $\bar{\varphi}_\mu(q; \mathbf{r})$ ортогональны с весом $v(\mathbf{r})$, если $\bar{\alpha}_\nu(q) \neq \bar{\alpha}_\mu(1)$. Поэтому соотношение ортонормированности имеет вид

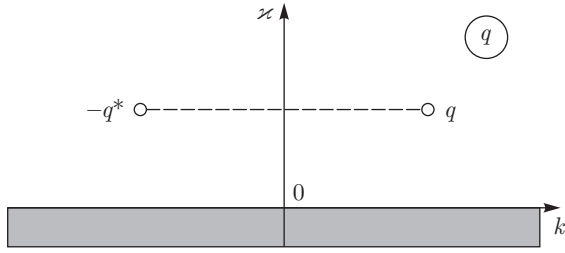
$$\int \bar{\varphi}_\mu(q; \mathbf{r}) \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}) v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}. \quad (\text{B.5})$$

Сделаем теперь существенное допущение, что система собственных функций полна и при комплексной энергии, так что выполняется соотношение

$$v(\mathbf{r}) \sum_\nu \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}) \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{B.6})$$

Интегральное уравнение для функции $\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})$ в данном случае имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}) &= -\frac{\bar{\alpha}_\nu(q)}{4\pi} \times \\ & \times \int \frac{e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (\text{B.7}) \end{aligned}$$



Отсюда следует асимптотическое выражение для $\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})$:

$$r \rightarrow \infty : \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}) \approx -\frac{\bar{\alpha}_\nu(q) \bar{u}_\nu(\mathbf{n}, q)}{4\pi} \frac{e^{iqr}}{r}, \quad (B.8)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r},$$

$$\bar{u}_\nu(\mathbf{n}, q) = \int e^{-iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'} \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (B.9)$$

Величины $\bar{u}_\nu(-\mathbf{n}, q)$ являются коэффициентами разложения функции $\exp(iq\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})$ по системе $\{\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})\}$:

$$e^{iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_\nu \bar{u}_\nu(-\mathbf{n}, q) \bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r}). \quad (B.10)$$

Случай центрально-симметричных потенциалов при $\varepsilon = q^2$ рассматривается аналогичным образом. Соответствующие результаты следуют из соотношений, полученных в разд. 3, при замене $k \rightarrow q$.

2. Введенные выше функции $\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})$ (как и собственные значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$) определены, таким образом, на всей верхней полуплоскости комплексной переменной q — см. рисунок. При переходе от q к $\varepsilon(q) = q^2$ эта полуплоскость разворачивается в целую плоскость комплексной энергии, разрезанную вдоль положительной действительной полуоси. Подобная плоскость (при условии $\text{Im} \sqrt{\varepsilon} = \text{Im} q > 0$ или, что то же, $\text{Re} \sqrt{-\varepsilon} > 0$) представляет собой физический лист соответствующей римановой поверхности комплексной энергии [1]. Нижняя полуплоскость ($\text{Im} q < 0$) при переходе от q к ε разворачивается во второй, нефизический, лист этой поверхности.

Результаты решения задачи в области комплексных энергий обобщают полученные ранее при отрицательных и положительных ε . Выражения для собственных значений и собственных функций при $\varepsilon < 0$ и $\varepsilon > 0$ следуют из формул для комплексных ε в соответствующих предельных случаях. Так,

$$\alpha_\nu(\varkappa) = \bar{\alpha}_\nu(i\varkappa), \quad \varphi_\nu(\varkappa; \mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(i\varkappa; \mathbf{r}), \quad (B.11)$$

$$\alpha_\nu^{(+)}(k) = \bar{\alpha}_\nu(k + i0), \quad (B.12)$$

$$\varphi_\nu^{(+)}(k; \mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(k + i0; \mathbf{r}),$$

$$\alpha_\nu^{(-)}(k) = \bar{\alpha}_\nu(-k + i0), \quad (B.13)$$

$$\varphi_\nu^{(-)}(k; \mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(-k + i0; \mathbf{r}).$$

Отметим, что как функции энергии $\varepsilon = k^2 > 0$ величины $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ и $\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})$ определены на верхнем берегу разреза на физическом листе, а $\alpha_\nu^{(-)}(k)$ и $\varphi_\nu^{(-)}(\mathbf{r})$ — на нижнем. Соответственно $\alpha_\nu(\varkappa)$ и $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ определены на отрицательной вещественной полуоси этого листа.

С другой стороны, собственные значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$ и собственные функции $\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})$ могут быть определены на всей полуплоскости $\text{Im} q > 0$ (т.е. на всем физическом листе комплексной энергии) по их известным предельным выражениям при $\varepsilon < 0$ или $\varepsilon > 0$ с помощью аналитического продолжения.

Заметим, что для $\bar{\alpha}_\nu(q)$ и $\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})$ имеют место соотношения симметрии, связывающие эти величины при $q = k + i\varkappa$ и $-q^* = -k + i\varkappa$:

$$\bar{\alpha}_\nu(-q^*) = \bar{\alpha}_\nu^*(q), \quad \bar{\varphi}_\nu(-q^*; \mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu^*(q; \mathbf{r}). \quad (B.14)$$

Действительно, согласно [9] зависимость $\bar{\alpha}_\nu(q)$ от q имеет следующий вид:

$$\bar{\alpha}_\nu(q) = a_\nu(q) + iqb_\nu(q). \quad (B.15)$$

Разложение функций $a_\nu(q)$ и $b_\nu(q)$ идет по четным степеням q с действительными коэффициентами, так что $a_\nu(-q^*) = a_\nu^*(q)$ и $b_\nu(-q^*) = b_\nu^*(q)$. Поэтому, проведя в (B.15) замену $q \rightarrow -q^*$, придем к первому соотношению (B.14).

Проведем такую же замену в (B.2) и сравним полученное равенство с комплексно сопряженным уравнением (B.2). Из этого сравнения следует, что одному и тому же собственному значению $\bar{\alpha}_\nu^*(q)$ отвечают две собственные функции, $\bar{\varphi}_\nu(-q^*; \mathbf{r})$ и $\bar{\varphi}_\nu^*(q; \mathbf{r})$. В отсутствие вырождения эти функции могут различаться только постоянным множителем. Из условия нормировки (B.5) следует, что этот коэффициент равен ± 1 . Выбираем $+1$, так как в этом случае при $q = i\varkappa$ собственная функция $\varphi_\nu(\varkappa; \mathbf{r})$ будет, как и должно быть, вещественной. Таким образом, второе равенство (B.14) также имеет место. В пределе $q \rightarrow k + i0$ из (B.14) следуют соотношения (56).

Умножим уравнение (B.2) на $\bar{\varphi}_\nu^*(q; \mathbf{r})$ и проинтегрируем по всему пространству. В результате для $\bar{\alpha}_\nu(q)$ получим выражение, из которого следует

$$\text{Im} \bar{\alpha}_\nu(q) = 2k\varkappa \int |\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \times \left[\int |\bar{\varphi}_\nu(q; \mathbf{r})|^2 v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right]^{-1}. \quad (B.16)$$

Согласно (В.16), для рассматриваемых $v(\mathbf{r}) > 0$ имеем $\text{Im } \bar{\alpha}_\nu(q) > 0$ при $k > 0$ и $\text{Im } \bar{\alpha}_\nu(q) < 0$ при $k < 0$.

В общем случае $k \neq 0$ и $\varkappa \neq 0$ величина (В.16) отлична от нуля. При $k \rightarrow 0$ в собственных функциях из (В.16) следует положить $q = i\varkappa$. В результате выражение (В.16) с учетом условия нормировки (3) и соотношения (7) принимает вид

$$\text{Im } \bar{\alpha}_\nu(q) \approx 2k\varkappa \left. \frac{d\alpha_\nu}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=-\varkappa^2} = -k \frac{d\alpha_\nu(\varkappa)}{d\varkappa}. \quad (\text{В.17})$$

В пределе $k \rightarrow 0$ выражение (В.17) обращается в нуль, как это и должно быть в области отрицательных энергий. Если же $\varkappa \rightarrow 0$, то мнимая часть $\bar{\alpha}_\nu(q)$ остается конечной, отличной от нуля, величиной. Действительно, в пределе $\varkappa \rightarrow 0$ интеграл в числителе выражения (В.16) расходится при $r \rightarrow \infty$ и его вычисление с использованием асимптотики (В.8) приводит к формуле (66), откуда следует, что $\text{Im } \bar{\alpha}_\nu(k) = \text{Im } \alpha_\nu^{(+)}(k) \neq 0$ при всех $k \neq 0$.

Таким образом, мнимая часть собственного значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$ отлична от нуля на всем физическом листе комплексной энергии за исключением отрицательной вещественной полуоси плоскости ε . Соответственно на полуплоскости $\text{Im } q = \varkappa > 0$ величина $\text{Im } \bar{\alpha}_\nu(q)$ обращается в нуль только на положительной мнимой полуоси.

3. Эти заключения подтверждаются на конкретных примерах. Так, для $v(r) = 1/\text{ch}^2 \gamma r$ собственные значения s -состояний (при $l = 0$) находятся в явном виде — см. формулу (91) из работы [6], где следует сделать замену $\varkappa \rightarrow -iq$:

$$\bar{\alpha}_{0n}(q) = -\gamma^2 \left(2n+1-i\frac{q}{\gamma} \right) \left(2n+2-i\frac{q}{\gamma} \right), \quad (\text{В.18})$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$. Явное выражение для собственного значения позволяет (с помощью аналитического продолжения) исследовать его свойства и в нижней полуплоскости $\text{Im } q < 0$. Положив в (В.18) $q = k+i\varkappa$, для $\text{Im } \bar{\alpha}_{0n}(q)$ получим

$$\text{Im } \bar{\alpha}_{0n}(q) = k [(4n+3)\gamma + 2\varkappa], \quad (\text{В.19})$$

откуда следует, что в комплексной плоскости q величина $\text{Im } \bar{\alpha}_{0n}(q)$ обращается в нуль на всей мнимой оси ($\text{Re } q = k = 0$), а также на серии прямых, параллельных действительной оси и расположенных в нижней полуплоскости при $\text{Im } q = \varkappa = -\gamma(4n+3)/2 < 0$. На этих прямых $\text{Re } \bar{\alpha}_{0n}(q) = (\gamma^2/4) + k^2 > 0$.

Отметим, что обобщение метода квантования потенциала на случай комплексных энергий не только

позволяет исследовать аналитические свойства амплитуды рассеяния и других величин, но и открывает возможность решения некоторых нестационарных задач с помощью, например, преобразования Лапласа.

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Для вывода соотношения ортонормированности для системы функций $\{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\}$ умножим уравнение

$$\nabla^2 \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) + k^2 \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \alpha v(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (\text{С.1})$$

на $\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})$, затем вычтем из него уравнение для $\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})$, умноженное на $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, и проинтегрируем по всему пространству. В результате получим

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \frac{r^2}{(k')^2 - k^2} \times \right. \\ \left. \times \int \left[\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})}{\partial r} - \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r})}{\partial r} \right] d\mathbf{m} \right\}, \quad (\text{С.2})$$

где $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$. Подстановка в равенство (С.2) соответствующих асимптотик вида (89) дает

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = W_1 + W_2 + W_3 + W_4. \quad (\text{С.3})$$

Здесь

$$W_1 = i \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \frac{r^2}{(k')^2 - k^2} \times \right. \\ \left. \times \int [(\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}) + (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{m})] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{m} \right\}, \quad (\text{С.4})$$

$$W_2 = i \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \frac{r}{(k')^2 - k^2} \times \right. \\ \left. \times \int [k + (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{m})] f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) e^{i\mathbf{k}r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{m} \right\}, \quad (\text{С.5})$$

$$W_3 = i \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \frac{r}{(k')^2 - k^2} \times \right. \\ \left. \times \int [(\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}) + k'] f^*(\mathbf{n}', \mathbf{m}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{m} \right\}, \quad (\text{С.6})$$

$$W_4 = i \left[\int f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) f^*(\mathbf{n}', \mathbf{m}) d\mathbf{m} \right] \times \\ \times \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k'-k)r}}{k' - k}. \quad (\text{С.7})$$

Используя асимптотику (83) для $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ и аналогичное выражение для $e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}$, получим

$$W_1 = \frac{8\pi^2}{k'k} \left\{ \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(k' - k)r}{k' - k} \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}') - \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(k' + k)r}{k' + k} \delta(\mathbf{n} + \mathbf{n}') \right\}. \quad (C.8)$$

В выражении (C.8) первый предел, как известно, равен $\pi \delta(k - k')$, а второй, представляющий собой бесконечно быстро осциллирующую функцию, следует считать равным нулю. Поэтому

$$W_1 = (2\pi)^3 \frac{\delta(k - k')}{k^2} \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}') = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (C.9)$$

Подстановка асимптотики функции $e^{-ik'r}$ в (C.5) дает

$$W_2 = -\frac{2\pi}{k'} \left\{ f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k' - k)r}}{k' - k} + f(\mathbf{n}, -\mathbf{n}') \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{i(k' + k)r}}{k' + k} \right\}. \quad (C.10)$$

Второй предел здесь должен быть отброшен, так что

$$W_2 = -\frac{2\pi}{k'} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k' - k)r}}{k' - k}. \quad (C.11)$$

Аналогичным образом находим

$$W_3 = \frac{2\pi}{k} \left\{ f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k' - k)r}}{k' - k} + f^*(\mathbf{n}', -\mathbf{n}) \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k' + k)r}}{k' + k} \right\}. \quad (C.12)$$

Отсюда, опустив равный нулю второй предел, получаем

$$W_3 = \frac{2\pi}{k} f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k' - k)r}}{k' - k}. \quad (C.13)$$

Таким образом,

$$W_2 + W_3 + W_4 = -2\pi \left[\frac{1}{k'} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') - \frac{1}{k} f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) - \frac{i}{2\pi} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) f^*(\mathbf{n}', \mathbf{m}) d\mathbf{m} \right] \times \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k' - k)r}}{k' - k}. \quad (C.14)$$

В равенстве (C.14) существенны $k' \approx k$. Разложение по степеням $k' - k$ дает

$$W_2 + W_3 + W_4 = -\frac{2\pi}{k} \left[f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') - f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) - \frac{ik}{2\pi} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{m}) f^*(\mathbf{n}', \mathbf{m}) d\mathbf{m} \right] \times \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(k' - k)r}}{k' - k} + \dots \quad (C.15)$$

Здесь выражение в квадратных скобках равно нулю в силу выполнения соотношения унитарности (102). Следующие члены разложения содержат $e^{-i(k' - k)r}$ без разности $k' - k$ в знаменателе и в пределе $r \rightarrow \infty$ обращаются в нуль. Таким образом,

$$W_2 + W_3 + W_4 = 0, \quad (C.16)$$

так что из равенства (C.3) с учетом (C.9) следует соотношение ортонормированности для системы $\{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\}$:

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (C.17)$$

Отметим, что в случае центрально-симметричного потенциала для системы радиальных функций $\{\psi_{kl}^{(+)}(r)\}$, определенных согласно (96), из (C.17) получаем соотношение ортонормированности в следующем виде:

$$\int_0^\infty \psi_{kl}^{(+)}(r) \psi_{k'l}^{(+)*}(r) r^2 dr = \frac{\pi}{2} \frac{\delta(k - k')}{k^2}. \quad (C.18)$$

При выводе равенства (C.18) использовались соотношения ортонормированности (31) и полноты (32) для системы сферических функций $\{Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
2. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, Мир, Москва (1969).
3. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, Мир, Москва (1969).
4. S. Weinberg, *Phys. Rev.* **131**, 440 (1963).
5. Б. Я. Балагуров, *ЖЭТФ* **126**, 986 (2004).
6. В. Я. Balagurov, *J. Comp. Methods in Sciences and Engineering* **10**, №№ 4–6, 105 (2010).
7. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. II, Наука, Москва (1974).
8. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
9. Б. Я. Балагуров, *Квантование потенциала в уравнении Шрёдингера*, URSS, Москва (2018).