

Непосредственное интегрирование дает

$$A_{nr} = \frac{1}{2} \frac{\operatorname{tg} \theta}{ab} \sqrt{\varepsilon_p \varepsilon_q \varepsilon_s \varepsilon_t} \left\{ \sin^2 \left[\frac{\pi a (q+t) \operatorname{tg} \theta}{2b} \right] \times \right. \\ \times \left[\frac{p(p+s) - q(q+t) \left(\frac{a}{b}\right)^2}{(p+s)^2 - \left[(q+t) \frac{a}{b} \operatorname{tg} \theta\right]^2} + \frac{p(p-s) - q(q+t) \left(\frac{a}{b}\right)^2}{(p-s)^2 - \left[(q+t) \frac{a}{b} \operatorname{tg} \theta\right]^2} \right] + \\ \left. + \sin^2 \left[\frac{\pi a (q-t) \operatorname{tg} \theta}{2b} \right] \left[\frac{p(p+s) - q(q-t) \left(\frac{a}{b}\right)^2}{(p+s)^2 - \left[(q-t) \frac{a}{b} \operatorname{tg} \theta\right]^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{p(p-s) - q(q-t) \left(\frac{a}{b}\right)^2}{(p-s)^2 - \left[(q-t) \frac{a}{b} \operatorname{tg} \theta\right]^2} \right] \right\}.$$

Выражение для N_{nn} имеет вид

$$N_{nn} = \frac{\varepsilon_p \varepsilon_q}{2ab} \left\{ \frac{ba}{2\varepsilon_p \varepsilon_q} - \frac{a^2 \operatorname{tg} \theta}{4\varepsilon_p \varepsilon_q} + \frac{b^2 \sin^2 \left(\pi q \frac{a}{b} \operatorname{tg} \theta \right)}{4\pi^2 q^2 \operatorname{tg} \theta} \left[1 - \frac{\left(\frac{q}{b}\right)^2 \operatorname{tg}^2 \theta}{\left(\frac{b}{a}\right)^2 - \left(\frac{q}{b}\right)^2 \operatorname{tg}^2 \theta} \right] \right\}.$$

Мы можем немедленно убедиться, что $A_{nr} = O(1/k_r)$, в то время как в случае двумерной задачи для общего случая произвольной поверхности $A_{nr} = O(1/\sqrt{k_r})$. Мы замечаем также, что для низшего состояния колебаний прямоугольника (при $p = q = 0$) A_{nr} равны нулю; следовательно, во всех порядках отсутствует изменение частоты. Это, конечно, правильно, так как $\varphi = \operatorname{const}$ будет удовлетворять условиям Неймана и на возмущенной поверхности.

9.3. Приложение методов теории возмущений к изучению рассеяния и дифракции

В §§ 9.1 и 9.2 мы делали упор на применение теории возмущений к определению собственных значений и собственных функций. Здесь мы рассмотрим задачи, в которых собственные значения образуют непрерывный спектр.

Так как собственные значения могут быть какими угодно, то наше внимание будет теперь сосредоточено на волновых функциях, которые должны быть описаны в области, простирающейся обычно до бесконечности (непрерывный спектр и возникает вследствие этого). Существует связь между поведением волновой функции на бесконечности и свойствами среды, в которой распространяются волны, что представляет очень большой интерес. Поведение на бесконечности обычно наблюдается экспериментально; свойства же среды, как правило, выводятся из измерений, сравнивая теоретические предсказания, полученные в предположении, что среда обладает теми или иными свойствами, с результатами эксперимента (см. дальнейшие рассуждения в §§ 11.3 и 12.3).

Наиболее распространенными являются следующие условия эксперимента: излучение источника, обычно помещенного в бесконечности, направ

лено на область, называемую *рассеивающей областью*, свойства которой отличаются от свойств окружающей среды. *Падающая волна* может быть, например, звуковой волной; среда — воздух, а неоднородность среды может создаваться некоторым твердым телом. В другом случае падающая волна может представлять собой пучок электронов с определенным импульсом, а рассеивающей областью может быть электрическое поле, создаваемое атомом. Ясно, что в каждом из этих случаев рассеивающая область

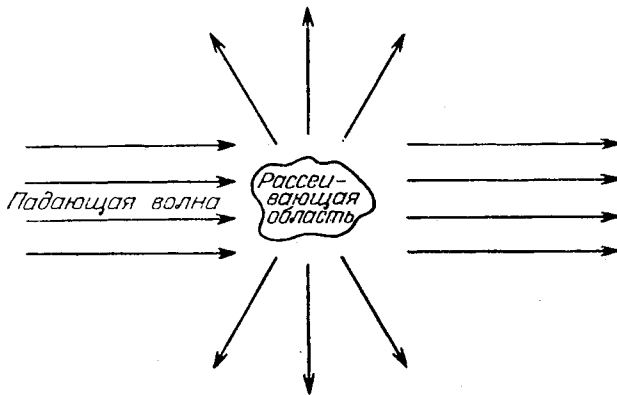


Рис. 9.7. Схематическое изображение падающей и рассеянной волны.

отклоняет часть падающих лучей от первоначального направления и создает *рассеянную волну*. На больших расстояниях от рассеивающей области мы наблюдаем и рассеянную и падающую волны.

В этом параграфе мы рассмотрим методы приближенного предсказания их относительной интенсивности. Точные решения задачи рассеяния будут рассмотрены в гл. 11. Мы ограничим наше исследование уравнением Шредингера и скалярным уравнением Гельмгольца; эти же методы можно применять и к другим уравнениям, причем в большинстве случаев возникающие затруднения невелики.

Граничные условия для рассеяния. Общую волновую функцию ψ можно разложить на падающую волну ψ_i и рассеянную ψ_s :

$$\psi = \psi_i + \psi_s. \quad (9.3.1)$$

Часть граничных условий, которая является общей для всех задач о рассеянии, состоит в том, что на больших расстояниях от рассеивающей области ψ_s приближается к волне, расходящейся из точечного источника, помещенного в рассеивающей области. В *трехмерном случае* мы можем считать ψ_i падающей плоской волной

$$\psi_i = e^{ikz},$$

тогда ψ_i удовлетворяет уравнению $\nabla^2 \psi_i + k^2 \psi_i = 0$. Граничные условия на бесконечности в этом случае требуют, чтобы

$$\psi_s \simeq f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \quad (9.3.2)$$

где r , ϑ и φ — сферические координаты с центром в рассеивающей области. Функция f называется *амплитудой рассеяния* или *фактором углового распределения*.

В двумерном случае падающая плоская волна ψ_i обычно записывается в виде

$$\psi_i = e^{ikhx}.$$

Рассеянная волна удовлетворяет условию

$$\psi_s \simeq f(\varphi) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (9.3.3)$$

Здесь r и φ — полярные координаты с центром в рассеивающей области, а угол φ отсчитывается от положительного направления оси x .

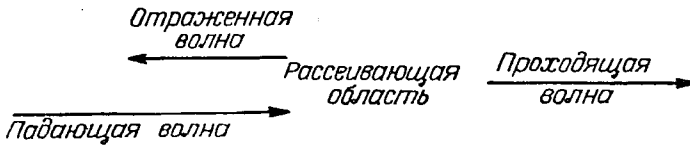


Рис. 9.8. Схематическое изображение одномерной задачи о прохождении и отражении волн.

В одномерных задачах употребляется несколько другая терминология, так как в этом случае рассеяние происходит вдоль направления падения. Возьмем снова падающую волну в виде

$$\psi_i = e^{ikhx}.$$

Граничные условия на бесконечности состоят теперь из двух частей. Для больших положительных значений x функция ψ приближается к проходящей плоской волне:

$$\psi \simeq Be^{ikhx} \text{ при } x \rightarrow \infty. \quad (9.3.4)$$

При больших отрицательных значениях x мы имеем сумму падающей и отраженной волн:

$$\psi \simeq e^{ikhx} + Ae^{-ikhx} \text{ при } x \rightarrow -\infty. \quad (9.3.5)$$

Поперечное сечение рассеяния. Величины, измеряемые на бесконечности, непосредственно связаны с функцией f или с коэффициентами A и B . Например, в акустике величина $|f(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega$ — это мощность, рассеянная внутрь телесного угла $d\Omega$ с направлением ϑ и φ , рассчитанная на единицу падающей интенсивности. С другой стороны, если ψ — шредингеровская волновая функция, то $|f(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega$ дает величину рассеянного потока внутри телесного угла $d\Omega$, приходящуюся на единицу плотности падающего потока. Таким образом, $|f(\vartheta, \varphi)|^2$ дает угловое распределение рассеянного излучения или рассеянных частиц. Ясно, что множитель $|f(\vartheta, \varphi)|^2$ имеет размерность площади; поэтому он часто называется *дифференциальным поперечным сечением рассеяния* σ :

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = |f(\vartheta, \varphi)|^2 \text{ в трехмерном случае.} \quad (9.3.6)$$

В двумерном случае $|f(\varphi)|^2 d\varphi$ дает мощность, рассеянную внутрь промежутка углов $d\varphi$, приходящуюся на единицу интенсивности падающего потока. Ясно, что в этом случае множитель имеет размерность длины и обычно также обозначается через σ :

$$\sigma(\varphi) = |f(\varphi)|^2 \text{ в двумерном случае.} \quad (9.3.7)$$

Полная рассеянная мощность, приходящаяся на единицу падающей интенсивности, или полный рассеянный поток на единицу плотности пада-

ющего потока получаются интегрированием $\sigma(\vartheta, \varphi)$ по всему телесному углу. Результат называется *полным поперечным сечением рассеяния* и обозначается буквой Q :

$$Q = \int \sigma(\vartheta, \varphi) d\Omega \text{ в трехмерном случае} \quad (9.3.8)$$

и

$$Q = \int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) d\varphi \text{ в двумерном случае.} \quad (9.3.9)$$

Полное поперечное сечение имеет простую физическую интерпретацию: это площадь (в двумерном случае отрезок прямой), нормальная к падающему пучку, загораживающая путь такому количеству падающей мощности, которое равно рассеянной.

Можно также выяснить физический смысл коэффициентов A и B в формулах (9.3.4) и (9.3.5) для одномерной задачи. Отраженная интенсивность, приходящаяся на единицу падающей интенсивности, называется *коэффициентом отражения* R и связывается с A по следующей формуле:

$$R = |A|^2. \quad (9.3.10)$$

Коэффициент прохождения T есть интенсивность прошедшей волны:

$$T = |B|^2. \quad (9.3.11)$$

При отсутствии поглощения $|A|^2 + |B|^2$ должно быть равно единице.

Рассеяние сферически симметричной областью. Сдвиги фаз. Если в уравнении Шредингера потенциал является функцией только r или если в акустике рассеивающая область имеет сферическую форму и изотропна, трехмерное уравнение можно свести к системе независимых одномерных уравнений относительно r . Они будут отличаться от одномерной задачи, рассмотренной ранее, так как $0 \leq r < \infty$, тогда как $-\infty < x < \infty$.

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$[\nabla^2 + (k^2 - \lambda U(r))] \psi = 0, \quad (9.3.12)$$

где

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \text{ и } \lambda U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \lambda V(r).$$

E равно полной энергии, а λV — потенциальной энергии частицы массы m . Можно применить метод разделения переменных, перейдя к сферическим координатам. Мы воспользуемся следующими элементарными решениями:

$$P_l(\cos \vartheta) \frac{u_l(kr)}{kr},$$

где P_l — полиномы Лежандра, а u_l удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \lambda U(r) \right] u_l = 0. \quad (9.3.13)$$

Это дифференциальное уравнение имеет два решения. Мы выделим то из них, которое равно нулю в начале координат, так как функция ψ не имеет там особенностей:

$$u_l(0) = 0. \quad (9.3.14)$$

Амплитуду u_l следует теперь выбрать так, чтобы ψ удовлетворяла граничному условию (9.3.2).

Для этих вычислений нам необходимо получить выражение для плоской волны в сферических координатах. Элементарные решения получаются, если положить $U=0$ в (9.3.13) и выбрать такое решение, которое ограничено в начале координат. Элементарные решения равны

$$P_l(\cos \vartheta) j_l(kr),$$

где [см. формулу (11.3.42)]

$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr).$$

Можно показать [см. формулу (11.3.45)], что

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) j_l(kr). \quad (9.3.15)$$

Эта форма для плоской волны приводит к мысли записать ψ в виде

$$\psi = \sum (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) \frac{u_l}{kr} \quad (9.3.16)$$

и подобрать u_l так, чтобы удовлетворилось граничное условие (9.3.2). Следовательно, будем считать, что

$$\psi - e^{ikz} = \psi_s = \sum (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) \left(\frac{u_l}{kr} - j_l \right).$$

Мы должны так выбрать u_l , чтобы

$$\frac{u_l}{kr} - j_l \simeq A_l \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Следовательно, u_l и j_l должны быть сравнимы. Асимптотически j_l ведет себя (при $r \rightarrow \infty$) следующим образом:

$$j_l(kr) \simeq \frac{\cos \left[kr - \frac{1}{2} \pi (l+1) \right]}{kr} \quad (r \rightarrow \infty).$$

Если $U(r)$ не простирается до бесконечности, то u_l асимптотически удовлетворяет тому же уравнению, что j_l . Следовательно, u_l можно записать в виде линейной комбинации двух решений свободного ($U=0$) волнового уравнения. Тогда получается следующее асимптотическое выражение для u_l :

$$u_l \simeq e^{-i\eta_l} \cos \left[kr - \frac{1}{2} \pi (l+1) - \eta_l \right], \quad (9.3.17)$$

где η_l — сдвиг фазы¹⁾. Амплитудный множитель выбран так, чтобы

$$\frac{u_l}{kr} - j_l \simeq (e^{-2i\eta_l} - 1) \frac{e^{i \left[kr - \frac{1}{2} \pi (l+1) \right]}}{2kr}.$$

Следовательно,

$$\psi_s \simeq \frac{1}{2ik} \sum (2l+1) P_l(\cos \vartheta) [e^{-2i\eta_l} - 1] \frac{e^{ikr}}{r}.$$

¹⁾ Обычно используется другое определение сдвига фазы, отличающееся знаком от определения (9.3.17). — *Прим. ред.*

Функция $f(\vartheta, \varphi)$ является коэффициентом при e^{ikr}/r , поэтому

$$\sigma(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4k^2} \left| \sum (2l+1) (e^{-2i\eta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta) \right|^2. \quad (9.3.18)$$

Полное поперечное сечение (в предположении, что η_l действительны) получается интегрированием:

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l. \quad (9.3.19)$$

Физический смысл этого результата будет рассмотрен подробно в гл. 11 и 12. Здесь нас интересует главным образом остающаяся математическая задача. Чтобы определить σ и Q , нам необходимо знать сдвиг фазы η_l . Его можно найти, решив дифференциальное уравнение (9.3.13) для u_l и выбрав решение, равное нулю в начале координат; исследуя, наконец, его асимптотическое поведение, можно найти η_l в соответствии с формулой (9.3.17).

Поучительно сравнить задачу об определении u_l и стандартную одномерную задачу. Заметим, что

$$u_l \simeq \text{const} [e^{-ikr} + (-1)^{l+1} e^{-2i\eta_l} e^{ikr}] \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Вспоминая, что $u_l(0) = 0$, мы видим, что $|(-1)^{l+1} \exp(-2i\eta_l)|^2$ можно истолковать как коэффициент отражения для волны $\exp(-ikr)$, падающей со стороны положительных r на рассеивающую область, оканчивающуюся при $r = 0$ совершенным отражателем.

Интегральное уравнение для рассеяния. Так же, как и в случае дискретного спектра, будет удобно использовать интегральное уравнение для неизвестной функции как исходный пункт для развития различных приближенных методов. Рассмотрим сначала полную трехмерную задачу, исходя из уравнения Шредингера, а затем обратимся к интегральному уравнению для u_l . Запишем (9.3.12) в форме неоднородного уравнения:

$$\nabla_0^2 \psi + k^2 \psi = \lambda U(\mathbf{r}_0) \psi,$$

где, как указано, мы не обязательно имеем дело с центральными силами. Используя затем для уравнения Гельмгольца функцию Грина для всего пространства $\exp(ikR)/R$, где $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$, мы имеем

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_i(\mathbf{r}) - \frac{\lambda}{4\pi} \int \frac{e^{ikR}}{R} U(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) dV_0. \quad (9.3.20)$$

Здесь мы добавили к частному решению, выражаемому интегралом, функцию ψ_i — решение однородного уравнения Гельмгольца. Можно теперь показать, что выражение (9.3.20) удовлетворяет граничным условиям на бесконечности. При больших r

$$R \simeq r - r_0 \cos \theta,$$

где θ — угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}_0 . Так как \mathbf{r} — вектор, направленный в точку наблюдения, то удобно ввести вектор \mathbf{k}_s с направлением вектора \mathbf{r} , но с величиной k , т. е.

$$\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0 = kr_0 \cos \theta. \quad (9.3.21)$$

Следовательно, в пределе при $r \rightarrow \infty$

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}} - \frac{\lambda}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} U(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) dV_0.$$

Амплитуда рассеяния $f(\vartheta, \varphi)$ является коэффициентом при $\exp(ikr)/r$, т. е.

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{\lambda}{4\pi} \int e^{-ik_s \cdot \mathbf{r}_0} U(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) dV_0. \quad (9.3.22)$$

Мы, таким образом, проверили, что волновая функция, удовлетворяющая уравнению (9.3.20), автоматически удовлетворяет граничным условиям на бесконечности, и одновременно мы получили выражение амплитуды рассеяния f через ψ . Уравнение (9.3.20) и является, таким образом, интегральным уравнением для рассеяния. Прежде чем заниматься приближенным решением этого уравнения, полезно выяснить важное соотношение между полным поперечным сечением Q и f . Мы покажем сейчас, что для консервативных систем (мы могли бы также доказать это и в случае, когда частицы или энергия поглощаются)

$$Q = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0), \quad (9.3.23)$$

где под $f(0)$ мы понимаем значение амплитуды $f(\vartheta, \varphi)$ для $\vartheta = 0$, или, принимая во внимание определение \mathbf{k}_s , для случая, когда \mathbf{k}_s в (9.3.22) равно \mathbf{k}_i . Другими словами, полное поперечное сечение связано с амплитудой рассеяния, вычисленной в направлении распространения падающей волны.

Чтобы доказать равенство (9.3.23), мы заметим, что из теоремы Грина и уравнений для ψ и ψ_i легко вытекает соотношение

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int \left(\bar{\psi}_i \frac{\partial \psi}{\partial n} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial n} \right) dS = \lambda \int \bar{\psi}_i U \psi dV.$$

Правую часть этого равенства можно переписать, используя выражение для $f(0)$, получаемое из (9.3.22). Кроме того, за поверхность интегрирования примем сферу радиуса r . Тогда

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int \left(\bar{\psi}_i \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial r} \right) dS = -4\pi f(0). \quad (9.3.24)$$

Левую часть (9.3.24) можно выразить через Q с помощью закона сохранения:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} \int \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial r} \right) dS &= 0, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} \int \left(\bar{\psi}_i \frac{\partial \psi_i}{\partial r} - \psi_i \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial r} \right) dS &= 0. \end{aligned} \quad (9.3.25)$$

Они, попросту говоря, означают сохранение излучения для полной или только для одной падающей волны (или в случае уравнения Шредингера — сохранение числа частиц). Если мы теперь в первом из этих двух равенств заменим ψ на $\psi_i + \psi_s$ и используем второе, то получим

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \left[2i \operatorname{Im} \int \left(\bar{\psi}_i \frac{\partial \psi_s}{\partial r} - \psi_s \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial r} \right) dS \right] + \lim_{r \rightarrow \infty} \int \left(\bar{\psi}_s \frac{\partial \psi_s}{\partial r} - \psi_s \frac{\partial \bar{\psi}_s}{\partial r} \right) dS = 0.$$

Принимая во внимание (9.3.2), мы видим, что второй из этих поверхностных интегралов равен

$$2ik \int |f(\vartheta, \varphi)|^2 d\Omega = 2ikQ.$$

Что же касается первого из поверхностных интегралов, то он приблизительно равен поверхностному интегралу в (9.3.24), как это можно показать,

подставив $\psi = \psi_i + \psi_s$ в (9.3.42) и используя условие сохранения (9.3.25) для плоской волны. Отсюда сразу получается теорема (9.3.23). Читатель может проверить (9.3.23), сравнивая (9.3.19) и выражение для $f(\vartheta, \varphi)$, данное в формуле, стоящей непосредственно перед (9.3.18).

В этом последнем рассуждении мы обращали главное внимание на рассеяние, которое возникает в результате объемного возмущения. Аналогичные результаты можно получить, если рассеяние появляется вследствие введения отражающей поверхности, т. е. вследствие поверхностных возмущений. Предположим, например, что ψ должна удовлетворять условиям Дирихле на поверхности S . Тогда интегральным уравнением для рассеяния будет

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_i(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ikR}}{R} \frac{\partial \psi}{\partial n_0} dS_0. \quad (9.3.26)$$

Переходя к пределу при $r \rightarrow \infty$, мы найдем, что граничные условия на бесконечности автоматически выполняются. Амплитуда рассеяния равна

$$f(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \int e^{-ik_s \cdot \mathbf{r}_0} \frac{\partial \psi}{\partial n_0} dS_0. \quad (9.3.27)$$

Мы предоставляем читателю доказать, что формула (9.3.23) и здесь остается справедливой.

Интегральное уравнение для одномерных задач. Рассмотрим уравнение

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + [k^2 - \lambda U(x)] \psi = 0. \quad (9.3.28)$$

Граничные условия выражаются соотношениями (9.3.4) и (9.3.5). Используем функцию Грина

$$G(x|x_0) = -\frac{1}{2ik} e^{ik|x-x_0|}, \quad (9.3.29)$$

удовлетворяющую уравнению

$$\frac{d^2 G}{dx^2} + k^2 G = -\delta(x-x_0).$$

Функция ψ удовлетворяет интегральному уравнению, ядром которого является G :

$$\psi(x) = e^{ikx} - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} G(x|x_0) U(x_0) \psi(x_0) dx_0. \quad (9.3.30)$$

Необходимо опять проверить, что выполняются граничные условия при $x = \pm \infty$. Для этой цели перепишем (9.3.30) подробнее:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \frac{\lambda}{2ik} \int_{-\infty}^x e^{ik(x-x_0)} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 + \\ &+ \frac{\lambda}{2ik} \int_x^{\infty} e^{-ik(x-x_0)} U(x_0) \psi(x_0) dx_0. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что при $|x| \rightarrow \infty$

$$\psi(x) \simeq e^{ikx} \left[1 + \frac{\lambda}{2ik} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 \right] \quad (x \rightarrow \infty),$$

$$\psi(x) \simeq e^{ikx} + \frac{\lambda}{2ik} e^{-ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 \quad (x \rightarrow -\infty).$$

Граничные условия (9.3.4) и (9.3.5) выполнены. Мы можем теперь немедленно получить выражение для коэффициента отражения

$$R = \frac{\lambda^2}{4k^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 \right|^2. \quad (9.3.31)$$

Коэффициент прохождения равен

$$T = \left| 1 + \frac{\lambda}{2ik} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 \right|^2. \quad (9.3.32)$$

Отметим мимоходом, что условие сохранения

$$R + T = 1$$

вытекает из следующего уравнения, написанного ниже, которое можно получить прямо из дифференциального уравнения для ψ :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(\bar{\psi} \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\bar{\psi}}{dx} \right) = \lim_{x \rightarrow -\infty} \left(\bar{\psi} \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\bar{\psi}}{dx} \right).$$

Интегральное уравнение в трехмерном случае. Обратимся теперь к интегральному уравнению для функции u_l , определенной уравнением (9.3.13) и соответствующими граничными условиями (9.3.14) и (9.3.17). Это интегральное уравнение даже в случае $l=0$ отличается от (9.3.30), так как включает другие граничные условия. Мы, естественно, используем функцию Грина, удовлетворяющую уравнению

$$\frac{d^2 G(r|r_0)}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] G(r|r_0) = -\delta(r-r_0).$$

Для того чтобы выполнялись граничные условия, функцию Грина нужно выбрать следующим образом:

$$G(r|r_0) = -kr r_0 \begin{cases} j_l(kr) n_l(kr_0) & \text{при } r \leq r_0, \\ j_l(kr_0) n_l(kr) & \text{при } r \geq r_0. \end{cases} \quad (9.3.33)$$

Функции j_l определены ранее (т. I, стр. 582), а n_l представляет собой сферическую функцию Неймана

$$n_l = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} N_{l+1/2}(kr),$$

определяемую формулой (11.3.42). Для u_l получается тогда такой интеграл:

$$u_l(r) = kr j_l(kr) - \lambda \int_0^{\infty} G(r|r_0) U(r_0) u_l(r_0) dr_0. \quad (9.3.34)$$

Подставляя выражение для $G(r|r_0)$, получим

$$\begin{aligned} u_l(r) = kr j_l(kr) + \lambda kr n_l(kr) \int_0^r r_0 j_l(kr_0) U(r_0) u_l(r_0) dr_0 + \\ + \lambda kr j_l(kr) \int_r^{\infty} r_0 n_l(kr_0) U(r_0) u_l(r_0) dr_0. \end{aligned}$$

Вспоминая, что krj_l стремится к нулю при $r \rightarrow 0$, мы видим, что граничное условие $u_l(0) = 0$ автоматически выполнено. Для больших значений r

$$krj_l(kr) \simeq \cos \left[kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi \right], \quad krn_l(kr) \simeq \sin \left[kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi \right].$$

Следовательно,

$$u_l \simeq \cos \left[kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi \right] + \lambda \sin \left[kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi \right] \int_0^{\infty} r_0 j_l(kr_0) U(r_0) u_l(r_0) dr_0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty. \quad (9.3.35)$$

Это согласуется с требованием (9.3.17), чтобы при больших r функция u_l была пропорциональна $\cos \left[kr - \frac{1}{2}(l+1)\pi - \eta_l \right]$. Теперь мы можем выразить η_l через интеграл, входящий в формулу (9.3.35):

$$\operatorname{tg} \eta_l = \lambda \int_0^{\infty} r_0 j_l(kr_0) U(r_0) u_l(r_0) dr_0. \quad (9.3.36)$$

Функция u_l , стоящая справа, должна быть пронормирована так, чтобы асимптотически вести себя в согласии с формулой (9.3.35). Таким образом, решение уравнения (9.3.34) удовлетворяет всем граничным условиям, и, следовательно, это уравнение является корректным интегральным уравнением для u_l .

Приближение Борна. Возмущенные решения интегральных уравнений для рассеяния изучаются методами, развитыми в § 9.1 в случае дискретного спектра собственных значений. Первым из этих методов был итерационно-пертурбационный. Он состоит в том, что сначала вместо неизвестной функции в подынтегральное выражение подставляется невозмущенная функция; это дает первое приближение. Второе приближение получается, если под знаком интеграла вместо неизвестной функции подставить первое приближение и т. д. Первое приближение для амплитуды рассеяния можно получить, подставив невозмущенную волновую функцию в различные интегральные выражения: (9.3.22), (9.3.27), (9.3.31) и (9.3.36). Например, в формуле (9.3.22) соответствующая невозмущенная волновая функция представляет собой падающую волну $\exp(ik_i \cdot \mathbf{r})$. Эта подстановка дает приближение Борна

$$f_B(\vartheta, \varphi) = -\frac{\lambda}{4\pi} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV. \quad (9.3.37)$$

Второе приближение для f мы найдем, подставив первое приближение для ψ в (9.3.22) и т. д. Получаются следующие рекуррентные формулы:

$$\psi^{(n)}(\mathbf{r}) = \psi_i(\mathbf{r}) - \frac{\lambda}{4\pi} \int \frac{e^{i\mathbf{k}R}}{R} U(\mathbf{r}_0) \psi^{(n-1)}(\mathbf{r}_0) dV_0; \quad (9.3.38)$$

$$f^{(n)}(\vartheta, \varphi) = -\frac{\lambda}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \psi^{(n-1)}(\mathbf{r}) dV.$$

Аналогичные результаты можно получить и для других интегральных уравнений рассеяния, рассмотренных выше; в главе 12 будут даны выражения для u_l и соответствующих им фазовых сдвигов. Из интегрального уравнения, полученного для поверхностных возмущений [например, уравнения (9.3.26)], можно вычислить первое приближение, если подставить вместо неизвестной функции ее главный член — падающую волну. Это

приближение часто называют *приближением Кирхгофа*. Из формулы (9.3.27) получается соответствующая амплитуда рассеяния:

$$f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) = \frac{i}{4\pi} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) \cdot \mathbf{r}_0} (\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{k}_i) dS_0. \quad (9.3.39)$$

Полное поперечное сечение можно вычислить из формулы (9.3.23). Однако можно показать, что если в этой формуле используется $\psi^{(n)}$, то полученное Q не лучше, чем $(n-1)$ -е приближение

$$Q \simeq \int |f^{(n-1)}|^2 d\Omega.$$

Поэтому не имеет большого смысла применять формулу (9.3.23) при такого рода схеме возмущений, хотя в других случаях мы найдем ее весьма полезной. Для иллюстрации заметим, что

$$f_B(0) = -\frac{\lambda}{4\pi} \int U(\mathbf{r}) dV.$$

Амплитуда рассеяния действительна, и поэтому формула (9.3.23) дает для поперечного сечения Q нуль, если функция U интегрируема.

Обратимся теперь к вопросу о сходимости последовательности (9.3.38) и аналогичных последовательностей, которые получаются с помощью итерационно-пертурбационного метода для других интегральных уравнений рассеяния. Как и при дискретном распределении собственных значений, рассмотренном в § 9.1, радиус сходимости итерационно-пертурбационной последовательности определяется величиной λ , для которой однородное интегральное уравнение рассеяния имеет ненулевое решение. Например, для уравнения (9.3.20) итерационно-пертурбационная последовательность перестает сходиться при λ , больших некоторого λ_0 , для которого имеет решение следующее уравнение:

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda_0}{4\pi} \int \frac{e^{i\mathbf{k}R}}{R} U(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) dV_0. \quad (9.3.40)$$

Здесь ищется, таким образом, решение, которое для больших значений r расходитя из рассеивающей области, причем это имеет место, несмотря на отсутствие падающей волны. Физически ясно, что для того, чтобы это случилось, рассеивающая область должна содержать в себе источники, или, другими словами, λ должно быть комплексным. Математически это означает, что ядро интегрального уравнения не дефинитно, и поэтому такой вывод не является неожиданным.

Этим специальным решениям однородного уравнения можно дать физическое истолкование, заметив, что при $\lambda = \lambda_0$ амплитуда рассеяния бесконечна. Мы можем поэтому ожидать, что когда λ изменяется вдоль действительной оси, поперечное сечение должно обнаруживать острый максимум или *резонанс* при приближении λ к величине действительной части λ_0 .

Так как λ_0 является функцией от k , то мы можем ожидать, что при *фиксированном* λ резонансы в рассеянии будут иметь место при таких значениях k , для которых $\text{Re} \lambda_0$ близко к λ . К этому же выводу можно прийти более непосредственно, поставив вопрос, для каких комплексных значений k_r параметра k при фиксированном λ уравнение (9.3.40) имеет ненулевое решение. При таких значениях k_r поперечное сечение опять-таки бесконечно. Следовательно, мы можем ожидать резонанса в поперечном сечении, когда k приближается к действительной части k_r . Заметим, что решения для $k = k_r$ очень похожи на связанные состояния системы

по характеру зависимости от r при больших r . В последнем случае

$$\psi(\text{связанное}) \simeq \frac{e^{-\lambda r}}{r},$$

в то время как для случая рассеяния

$$\psi(\text{свободное}) \simeq \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Следовательно, эти состояния системы являются логическим расширением понятия связанных состояний на непрерывный спектр. Они часто называются *виртуальными уровнями* и будут более подробно рассмотрены в гл. 12. Пока же мы отметим, что радиус сходимости итерационно-пертурбационного ряда как функции энергии определяется энергией, при которой наступает резонанс.

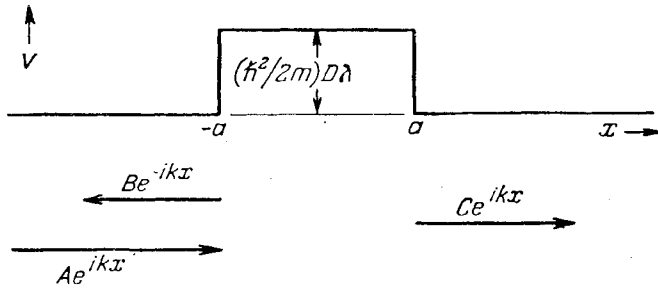


Рис. 9.9. Отражение и резонанс в одномерной задаче рассеяния.

В качестве примера к этим рассуждениям мы рассмотрим одномерное уравнение Шредингера при потенциальной энергии, заданной так, как показано на рис. 9.9. На рисунке изображены волны, существующие при $x > -a$ и $x > a$. При $-a < x < a$ мы берем $Ee^{ixx} + Fe^{-ixx}$, где

$$\chi = \sqrt{k^2 - \lambda D}.$$

Затем, вычисляя производную и значение ψ при $x = a$, мы получаем

$$Ce^{ika} = Ea^{ixa} + Fe^{-ixa}; \quad kCe^{ika} = \chi Ee^{ixa} - \chi Fe^{-ixa}.$$

Теперь можно выразить E и F через C :

$$E = \frac{kC}{2\chi} \left(\frac{\chi}{k} + 1 \right) e^{i(k-x)a},$$

$$F = \frac{kC}{2\chi} \left(\frac{\chi}{k} - 1 \right) e^{i(k+x)a}.$$

Мы можем снова вычислить значение производной уже при $x = -a$:

$$A = -Be^{2ika} + Ee^{i(k-x)a} + Fe^{i(k+x)a},$$

$$A = Be^{2ika} + [Ee^{i(k-x)a} - Fe^{i(k+x)a}] \frac{\chi}{k}.$$

Подставляя вместо E и F их выражения через C , получаем для C

$$C = A \frac{4k\chi \exp(-2ika)}{(\chi+k)^2 \exp(-2ixa) - (\chi-k)^2 \exp(2ixa)}. \quad (9.3.41)$$

Решения при исчезающе малом A (условие существования виртуального уровня) будут существовать, только если знаменатель в формуле (9.3.41) равен нулю. Иными словами, C обращается в бесконечность для тех k (или λ), для которых этот знаменатель обращается в нуль,

когда A конечно. Кроме того, ясно, что всякое разложение этого выражения по степеням λ или по степеням k перестает быть справедливым, как только λ или k^2 приближается к тому критическому значению, при котором амплитуда прохождения становится бесконечной. В заключение мы покажем, что критические значения существуют. Определяющее уравнение имеет вид

$$i \operatorname{tg}(2\kappa a) = \frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2}.$$

Если, например, $\kappa a \ll 1$, т. е. энергия падающей частицы почти равна энергии потенциального барьера, то это уравнение принимает вид

$$a(2k^2 - \lambda D) = -ik,$$

откуда можно определить критическое значение λ или k . Решения являются комплексными величинами.

Борновские приближения высших порядков. Если предположить, что мы работаем в области сходимости итерационно-пертурбационных рядов, то трудности в вычислении интегралов все же ограничивают пригодность этих рядов. В одномерных задачах часто первое приближение можно вычислить аналитически и тогда получить второе приближение Борна для η_i . Третье и более высокие приближения получаются численным методом, который возможен здесь благодаря тому, что интегралы одномерны. Однако при решении двумерных и трехмерных задач численные методы значительно более трудоемки и утомительны. В этих условиях часто бывает полезно привлечь разложение функции Грина по собственным функциям. В настоящем случае соответствующими собственными функциями являются плоские волны

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}),$$

пронормированные так, что

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}} dV = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0).$$

Разложение функции Грина по этим собственным функциям можно выполнить по общим правилам, изложенным в гл. 7. Мы получим

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{4\pi R} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}}{K^2 - k^2} dV_K. \quad (9.3.42)$$

Чтобы понять эту формулу и, следовательно, дальнейшие рассуждения, нужно проверить это равенство непосредственно. Переходя к сферическим координатам в пространстве K , мы быстро сводим этот интеграл к интегралу по K :

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{4\pi R} = \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty \frac{K \sin(KR)}{K^2 - k^2} dK.$$

Теперь нужно выбрать путь интегрирования на комплексной плоскости K . Наш выбор, показанный на рис. 9.10, продиктован требованием получить расходящуюся волну.

Так как подинтегральное выражение четно по K , то последнее соотношение можно переписать в виде

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{4\pi R} = \frac{1}{4\pi^2 R} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{K \sin(KR)}{K^2 - k^2} dK,$$

где путь интегрирования выбран так, как это указано на рис. 9.11. Интеграл можно теперь без труда вычислить с помощью интегральной формулы Коши (4.2.9), и таким образом формула (9.3.42) проверена.

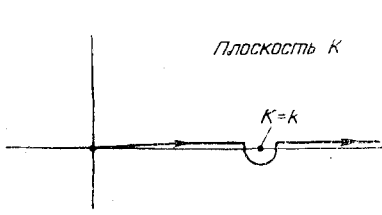


Рис. 9.10. Выбор контура для преобразования Фурье функции Грина.

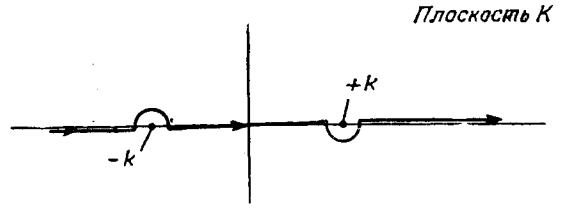


Рис. 9.11. Продолженный контур интегрирования для функции Грина.

Подстановка в интегральное уравнение (9.3.20) дает

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_i(\mathbf{r}) - \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \int \int \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}}{K^2 - k^2} U(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) dV_0 dV_K. \quad (9.3.43)$$

Введем теперь обозначения

$$T(\mathbf{K}|\mathbf{k}_i) = \lambda \int e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV_r, \quad (9.3.44)$$

$$U(\mathbf{K}|\mathbf{k}) = \lambda \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV_r. \quad (9.3.45)$$

Из формулы (9.3.22) ясно, что

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} T(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i), \quad (9.3.46)$$

в то время как первое приближение Борна (9.3.37) равно

$$f_B(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} U(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i). \quad (9.3.47)$$

Мы можем получить теперь интегральное уравнение, определяющее T , умножив обе части уравнения (9.3.43) на $\lambda U(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})$ и проинтегрировав:

$$T(\mathbf{p}|\mathbf{k}_i) = U(\mathbf{p}|\mathbf{k}_i) - \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int \frac{U(\mathbf{p}|\mathbf{K}) T(\mathbf{K}|\mathbf{k}_i)}{K^2 - k^2} dV_K. \quad (9.3.48)$$

Это интегральное уравнение эквивалентно, конечно, первоначальному интегральному уравнению (9.3.20). Но оно имеет преимущество перед первым, так как в последнем мы имеем дело непосредственно с амплитудой рассеяния.

Применяя итерационно-пертурбационный метод, немедленно получаем первое и более высокие приближения Борна. Мы используем верхний индекс для указания порядка приближения.

$$T^{(1)}(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i) = U(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i), \quad (9.3.49)$$

$$T^{(2)}(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i) = U(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{U(\mathbf{k}_s|\mathbf{K}_1) U(\mathbf{K}_1|\mathbf{k}_i)}{K_1^2 - k^2} dV_{K_1},$$

$$T^{(3)}(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i) = T^{(2)}(\mathbf{k}_s|\mathbf{k}_i) + \frac{1}{(2\pi)^6} \int \int \frac{U(\mathbf{k}_s|\mathbf{K}_1) U(\mathbf{K}_1|\mathbf{K}_2) U(\mathbf{K}_2|\mathbf{k}_i)}{(K_1^2 - k^2)(K_2^2 - k^2)} dV_{K_1} dV_{K_2} \quad (9.3.50)$$

и т. д. Пример применения этих формул будет дан в этом параграфе позднее.

Чтобы получить соответствующие интегральные уравнения для одномерной и двумерной задач, необходимо заменить множитель $(2\pi)^{-3}$ на $(2\pi)^{-n}$, где n — число измерений, и, конечно, объемные интегралы в пространствах \mathbf{K} и \mathbf{r} на соответствующие им интегралы более низкой размерности.

Ряд Фредгольма. В итерационно-пертурбационные формулы, данные выше в виде первого и более высоких приближений по Борну, можно внести улучшения, приспособив для этого к задаче рассеяния метод Фредгольма и вариационно-пертурбационный метод, разобранные в § 9.1. Мы не будем рассматривать ряд Финберга, а разберем только ряд Фредгольма. Вариационно-итерационный метод также отложим до § 9.4, где он будет применен к задаче рассеяния.

Ряд Фредгольма, данный в формулах (9.1.60) и (9.1.65), можно непосредственно применить к интегральным уравнениям рассеяния, так как ряд Фредгольма имеет силу для любого уравнения второго рода. Для одномерных задач решение уравнения

$$\mathbf{e} = \mathbf{f}_0 + \lambda \mathfrak{K} \mathbf{e}$$

выражается формулой (мы берем только несколько первых членов)

$$\mathbf{e} = \left\{ 1 + \lambda \mathfrak{K} \left[\frac{1 + \lambda (\mathfrak{K} - \kappa_1) + (\lambda^2/2) (2\mathfrak{K}^2 - 2\kappa_1 \mathfrak{K} + \kappa_1^2 - \kappa_2) + \dots}{1 - \lambda \kappa_1 + (\lambda^2/2) (\kappa_1^2 - \kappa_2) - \dots} \right] \right\} \mathbf{f}_0, \quad (9.3.51)$$

где κ_n представляют собой следы итерированных операторов \mathfrak{K} , как это определено в (9.1.54). Это выражение нельзя использовать для двумерных и трехмерных задач, поскольку κ_1 в этих случаях бесконечно. Соответствующую формулу можно получить из приведенной выше формальной подстановкой $\kappa_1 = 0$, как это показано в § 9.1. Ряды в числителе и знаменателе сходятся для всех значений λ и могут быть в принципе использованы для вычисления амплитуды рассеяния в любом порядке приближения. Чтобы сделать последнюю формулу более конкретной, мы выпишем явно числитель выражения для рассеянной волны в одномерной задаче, выраженной уравнением (9.3.30):

$$\begin{aligned} & -\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} G(x|x_0) U(x_0) e^{ikhx_0} dx_0 + \\ & + \lambda^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x|x_1) U(x_1) G(x_1|x_0) U(x_0) e^{ikhx_0} dx_0 dx_1 - \\ & - \lambda^2 \left[\int_{-\infty}^{+\infty} G(x|x_0) U(x_0) e^{ikhx_0} dx_0 \right] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} G(x_0|x_0) U(x_0) dx_0 \right] + \dots \end{aligned}$$

Знаменателю ряда Фредгольма можно дать физическую интерпретацию. Для этой цели мы заметим, что задачу рассеяния всегда можно заменить эквивалентной ей задачей излучения, в которой возбуждение излучающей системы производится падающей волной, а получающееся излучение образует рассеянную волну. Амплитуда излученной волны будет содержать типичный импедансный знаменатель вида $r + ix$. Активный член r относится к энергии, которая излучается системой и доходит до детектора на больших расстояниях от системы. Реактивные члены не содержат никаких потерь энергии и возникают из-за того, что излученная волна частично распадается, когда расстояние от излучающей системы возрастает. Величина x стремится к нулю при резонансных энергиях, рассмотренных ранее в разделе о сходимости высших приближений

Борна. Мы должны также ожидать, что активный член зависит от полного поперечного сечения, так как последнее характеризует излученную мощность.

Чтобы продемонстрировать соотношение между знаменателем Фредгольма и импедансом, рассмотрим первый вблизи резонанса, т. е. при λ , близких к λ_r . Тогда [см. (9.1.53)]

$$\chi(\lambda) = \exp \left[- \int_0^\lambda \text{Spur} \left(\frac{\mathfrak{F}}{1 - \lambda \mathfrak{F}} \right) d\lambda \right] \simeq \text{const} (\lambda - \lambda_r).$$

λ является функцией от k^2 , и при $k^2 = k_r^2 - i\gamma/2$ λ равно λ_r (k_r — действительное). Поэтому

$$\chi(\lambda) \simeq \text{const} \left[k^2 - k_r^2 + \frac{i\gamma}{2} \right] \left(\frac{\partial \lambda}{\partial (k^2)} \right)_{k^2 = k_r^2 - i\gamma/2}.$$

Амплитуда рассеяния f содержит $\chi(\lambda)$ в знаменателе, и, таким образом, получается типичное резонансное рассеяние при $k^2 = k_r^2$. Как указано выше, эта формула напоминает результат воздействия на простую гармоническую систему с резонансной угловой частотой k_r и Q , равным $\gamma/2$, допускающую определение соответствующего импеданса.

Убедимся теперь, что знаменатель в ряде Фредгольма содержит полное поперечное сечение. Рассмотрим трехмерный случай, в котором этот знаменатель с точностью до второго порядка равен $1 - \lambda^2 \chi_2/2$, где χ_2 выражается формулой

$$\lambda^2 \chi_2 = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^6 \int \int \frac{U(\mathbf{p}|\mathbf{K}) U(\mathbf{K}|\mathbf{p})}{(K^2 - k^2)(p^2 - k^2)} dV_K dV_p.$$

Используя формулу (9.3.49), получим

$$\lambda^2 \chi_2 = - \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int \frac{T^{(2)}(\mathbf{p}|\mathbf{p}) - U(\mathbf{p}|\mathbf{p})}{p^2 - k^2} dV_p.$$

Интегрирование по \mathbf{p} разобьем на две части; одна появляется из-за полюса при $\mathbf{p} = \mathbf{k}$ и, следовательно, разрешает \mathbf{p} быть равным \mathbf{k} в падающей волне. Перепишем χ_2 следующим образом:

$$\lambda^2 \chi_2 = - \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \left[\frac{1}{2} \oint \frac{T^{(2)}(\mathbf{p}|\mathbf{p}) - U(\mathbf{p}|\mathbf{p})}{p^2 - k^2} dV_p + \right. \\ \left. + \mathcal{P} \int \frac{T^{(2)}(\mathbf{p}|\mathbf{p}) - U(\mathbf{p}|\mathbf{p})}{p^2 - k^2} dV_p \right],$$

где первый интеграл берется по замкнутому контуру вокруг $p = k$. Символ \oint перед вторым интегралом означает, что берется главное значение интеграла [см. (4.2.9)], которое получается взятием среднего арифметического из результатов, полученных при интегрировании по двум контурам, обозначенным цифрами 1 и 2 на рис. 9.12. Первый интеграл можно вычислить с помощью интегральной теоремы Коши, так что окончательно

$$\lambda^2 \chi_2 = - \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \left\{ \frac{k\pi i}{2} \int [T^{(2)}(\mathbf{k}|\mathbf{k}) - U(\mathbf{k}|\mathbf{k})] d\Omega_k + \right. \\ \left. + \mathcal{P} \int \frac{T^{(2)}(\mathbf{p}|\mathbf{p}) - U(\mathbf{p}|\mathbf{p})}{p^2 - k^2} dV_p \right\}. \quad (9.3.52)$$

Здесь \mathbf{k} — вектор длины k . Величины $U(\mathbf{k}|\mathbf{k})$ и $T^{(2)}(\mathbf{k}|\mathbf{k})$ являются первым и вторым приближениями Борна для амплитуды рассеяния в направлении \mathbf{k} плоской волны, падающей в направлении \mathbf{k} . Эти амплитуды зависят от направления \mathbf{k} , если рассеивающая система не имеет сферической симметрии. В этом случае мы воспользуемся формулой (9.3.23),

из которой получим

$$\text{Im } T^{(2)}(\mathbf{k} | \mathbf{k}) = -kQ_B(\mathbf{k}), \quad (9.3.53)$$

где Q_B является первым борновским приближением для полного поперечного сечения. Следовательно, знаменатель в ряде Фредгольма содержит член, пропорциональный $k^2 \bar{Q}_B$, где \bar{Q}_B — полное борновское поперечное сечение, усредненное по всем углам падения.

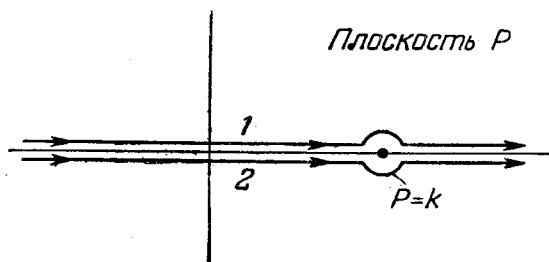


Рис. 9.12. Контуры, применяемые для получения главного значения интеграла для χ_2 .

Если, с другой стороны, система сферически симметрична, мы можем положить

$$U(\mathbf{k} | \mathbf{k}) = -4\pi f_B(0), \quad T^{(2)}(\mathbf{k} | \mathbf{k}) = -4\pi f_B^{(2)}(0),$$

где f_B и $f_B^{(2)}$ — первое и второе борновские приближения для амплитуды рассеяния в направлении распространения падающей волны. Подставляя эти выражения в формулу (9.3.52), имеем

$$\lambda^2 \chi_2 = ik [f_B^{(2)}(0) - f_B(0)] - \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \oint \frac{T^{(2)}(\mathbf{p} | \mathbf{p}) - U(\mathbf{p} | \mathbf{p})}{p^2 - k^2} dV_p. \quad (9.3.54)$$

Пример. Рассмотрим прохождение и отражение волн материи для случая потенциального барьера, изображенного на рис. 9.9. Точное значение амплитуды прохождения C/A дается формулой (9.3.41). Эквивалентное интегральное уравнение и точное выражение для амплитуды прохождения даны в формулах (9.3.29)–(9.3.32). Так как $U(x_0)$ отлично от нуля только при $-a < x_0 < +a$, то ясно, что для того, чтобы получить $(n+1)$ -е приближение ψ и амплитуды прохождения, необходимо знать величину n -го приближения ψ , $\psi^{(n)}(x_0)$, только в этой области. Принимая за нулевое приближение невозмущенную падающую волну и используя рекуррентные соотношения (9.3.38), мы находим при $-a < x < a$, что

$$\psi^{(0)} = \exp(ikx),$$

$$\psi^{(1)} = \exp(ikx) + \frac{\lambda D}{2ik} \left\{ \left(x + a - \frac{1}{2ik} \right) \exp(ikx) + \frac{1}{2ik} \exp[ik(2a-x)] \right\}.$$

Используя формулу (9.3.32), мы можем получить первое и второе приближение Борна для амплитуды прохождения $f^{(1)}$ и $f^{(2)}$:

$$f^{(1)} = 1 + \frac{\lambda D}{2ik} 2a,$$

$$f^{(2)} = f^{(1)} + \left(\frac{\lambda D}{2ik}\right)^2 \left[2a \left(a - \frac{1}{2ik} \right) + \frac{\exp(2ika) \sin(2ka)}{2ik^2} \right].$$

Сравним это с точным выражением (9.3.41), которое мы переищем так:

$$f = \frac{1}{1 - \frac{(\kappa - k)^2}{4k\kappa} [\exp(4ika) - 1]}.$$

Его можно разложить в степенной ряд относительно D :

$$f \simeq 1 + \frac{i}{2} \left(\frac{\lambda D}{2k^2} \right)^2 \exp(2ika) \sin(2ka).$$

Мы видим, что борновские приближения плохо соответствуют разложениям точного выражения амплитуды по степеням D . Этого можно было ожидать, так как величина силы взаимодействия зависит от a , так же как и от D . По-видимому, ответственным за это является наличие полюса в формуле (9.3.41). Однако, если вычислять коэффициент прохождения $T = |f|^2$, получается

$$T \simeq 1 - \left[\frac{\lambda D \sin(2ka)}{2k^2} \right]^2 \simeq T^{(2)},$$

где $T^{(2)}$ вычисляется по $f^{(2)}$ с точностью до величин порядка D^2 . Второе приближение Борна дает, следовательно, в этом порядке точное выражение для амплитуды прохождения, фаза же получается неправильной.

Обратимся теперь к разложению Фредгольма. Борновское приближение содержит разложение f в окрестности $k = \kappa$. Ряд Фредгольма, как мы увидим, надо сравнить с отдельными разложениями числителя (это не нужно в данном конкретном случае, так как числитель равен 1) и знаменателя. Из формулы (9.3.51) мы немедленно получаем

$$f \simeq 1 + \frac{(f^{(1)} - 1) + (f^{(2)} - f^{(1)}) - \lambda \kappa_1 (f^{(1)} - 1)}{1 - \lambda \kappa_1 + (\lambda^2/2)(\kappa_1^2 - \kappa_2)},$$

где $f^{(1)}$ и $f^{(2)}$ — борновские амплитуды. Следы κ_1 и κ_2 являются следами оператора $(1/2ik) \int \exp(ik|x - x_0|) U(x_0)$ и даются формулами

$$\kappa_1 = \frac{1}{2ik} \int_{-\infty}^{\infty} U(x_0) dx_0,$$

$$\kappa_2 = -\frac{1}{4k^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U(x_1) \exp(2ik|x_1 - x_0|) U(x_0) dx_0 dx_1.$$

Эти интегралы можно легко вычислить:

$$\begin{aligned} \lambda \kappa_1 &= \frac{\lambda D}{2ik} 2a = f^{(1)} - 1, \\ \frac{\lambda^2}{2} (\kappa_1^2 - \kappa_2) &= \frac{D^2 \lambda^2}{8ik^3} \left[\frac{1}{k} \exp(2ika) \sin(2ka) - 2a \right] - \frac{D^2 \lambda^2 a^2}{2k^2} = \\ &= -(f^{(2)} - f^{(1)}) + (f^{(1)} - 1)^2. \end{aligned}$$

Следовательно, результат в методе Фредгольма получается таким:

$$f \simeq \frac{1}{1 - (f^{(2)} - 1) + (f^{(1)} - 1)^2}.$$

1) Эта формула для f неправильна: в числителе отсутствует множитель $\exp[2i(\kappa - k)a]$ и в экспоненте знаменателя вместо κ стоит k . Разложение исправленного выражения для f по степеням D совпадает с борновскими приближениями. — Прим. ред.

Коэффициент прохождения T , вычисленный до второго порядка относительно D в знаменателе, оказывается равным

$$T \approx \frac{1}{1 + \left[\frac{\lambda D \sin(2ka)}{2k^2} \right]^2}.$$

Мы видим, что результат в методе Фредгольма почти всегда лучше, чем второе приближение Борна, так как первый не содержит ошибки, появляющейся из-за разложения κ около k при выполнении дальнейшего разложения знаменателя.

Трехмерный пример. Высшие борновские приближения можно вычислить аналитически только в некоторых случаях. Одним из них является потенциал Юкава:

$$U = \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}.$$

Мы применим исследование в импульсном пространстве, приводящее к формулам (9.3.49) и (9.3.50). Матричные элементы $U(\mathbf{k}_s | \mathbf{k}_i)$, входящие в них, определены формулой (9.3.45) и для указанного выше потенциала равны

$$U(\mathbf{k}_s | \mathbf{k}_i) = \frac{4\pi\lambda}{\mu(\mu^2 + |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s|^2)} = \frac{4\pi\lambda}{\mu \left(\mu^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right)}.$$

Первым борновским приближением для амплитуды $f(\vartheta, \varphi)$ будет поэтому, согласно (9.3.47),

$$f_B(\vartheta, \varphi) = -\frac{\lambda}{\mu(\mu^2 + |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s|^2)}.$$

Второе борновское приближение можно получить из $(-1/4\pi) T^{(2)}(\mathbf{k}_s | \mathbf{k}_i)$, где

$$T^{(2)}(\mathbf{k}_s | \mathbf{k}_i) = U(\mathbf{k}_s | \mathbf{k}_i) - \frac{2\lambda^2}{\pi\mu^2} \int \frac{dV_K}{(\mu^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{k}_s|^2)(\mu^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{k}_i|^2)(K^2 - k^2)}.$$

Вычисление этого интеграла можно, как мы увидим, свести к вычислению

$$J = \int \frac{dV_K}{(\tau^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{p}|^2)(K^2 - k^2)}.$$

Мы примем \mathbf{p} за ось z сферической системы координат (K, α, β) в \mathbf{K} -пространстве. Интегрирование по β можно осуществить сразу, так что

$$J = 2\pi \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_0^\infty \frac{K^2 dK}{(\tau^2 + K^2 + p^2 - 2Kp \cos \alpha)(K^2 - k^2)}.$$

Мы получим более удобное выражение для J , если сделаем подстановку $\alpha = \pi - \psi$ и $K = -K'$ и затем возьмем среднее арифметическое полученного таким образом и данного выше J :

$$J = \pi \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{K^2 dK}{(\tau^2 + K^2 + p^2 - 2Kp \cos \alpha)(K^2 - k^2)}.$$

Интегрирование по K производится по контуру, приведенному на рис. 9.11. Этот контур можно замкнуть полуокружностью бесконечного радиуса в верхней полуплоскости. После этого можно применить теорему о вычетах, учитывая, что подинтегральная функция имеет полюсы в нулях K_0 и K_1 знаменателя:

$$K_0 = k \quad \text{и} \quad K_1 = p \cos \alpha + i \sqrt{\tau^2 + p^2 \sin^2 \alpha}.$$

Разбивая J на соответствующие интегралы, имеем

$$J = J_0 + J_1,$$

где

$$J_0 = \pi^2 i k \int_{-1}^{+1} \frac{dx}{\tau^2 + k^2 + p^2 - 2kpx}$$

и

$$J_1 = \frac{\pi^2 i}{p} \int_{i\tau-p}^{i\tau+p} \frac{K_1}{K_1^2 - k^2} dK_1.$$

Следовательно, окончательно

$$J = \frac{\pi^2 i}{p} \ln \left(\frac{k+p+i\tau}{k-p+i\tau} \right).$$

Нам также будет необходимо знать величину L :

$$L = \int \frac{dV_K}{(\tau^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{p}|^2)^2 (K^2 - k^2)}.$$

Этот интеграл можно получить, дифференцируя J по τ :

$$L = -\frac{\pi^2}{\tau [k^2 - \tau^2 - p^2 + 2ik\tau]}.$$

Интеграл, участвующий в $T^{(2)}(\mathbf{k}_s | \mathbf{k}_i)$,

$$M = \int \frac{dV_K}{(\mu^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{k}_s|^2) (\mu^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{k}_i|^2) (K^2 - k^2)}$$

можно связать с L при помощи соотношения

$$\frac{1}{ab} = \int_{-1}^{+1} \frac{2dz}{[a(1+z) + b(1-z)]^2}.$$

Из него следует, что

$$M = 2 \int_{-1}^{+1} dz \int \frac{dV_K}{[2\mu^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{k}_s|^2 (1+z) + |\mathbf{K} - \mathbf{k}_i|^2 (1-z)]^2 (K^2 - k^2)}.$$

Переписав знаменатель в соответствии с формой L , мы получим

$$M = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} dz \int \frac{dV_K}{K^2 - k^2} \left\{ \mu^2 + k^2 (1-z^2) \sin^2 \left(\frac{1}{2} \alpha \right) + \left| \frac{1}{2} (1+z) \mathbf{k}_i + \frac{1}{2} (1-z) \mathbf{k}_s - \mathbf{K} \right|^2 \right\}^{-2}.$$

Интеграл по пространству \mathbf{K} записан теперь в более удобной форме, причем

$$\tau^2 = \mu^2 + k^2 (1-z^2) \sin^2 \left(\frac{1}{2} \alpha \right),$$

$$\mathbf{p} = \frac{1}{2} (1+z) \mathbf{k}_i + \frac{1}{2} (1-z) \mathbf{k}_s.$$

Так как длины \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_s равны k , то

$$\tau^2 + p^2 = \mu^2 + k^2.$$

Следовательно,

$$M = -\frac{\pi^2}{2} \int_{-1}^1 \frac{dz}{\tau(-\mu^2 + 2ik\tau)}.$$

Благодаря тому что τ^2 является простой алгебраической функцией от z , этот интеграл можно найти в явном виде:

$$M = \frac{\pi^2}{k \sin \frac{1}{2} \vartheta \sqrt{\mu^4 + 4k^2 \left(\mu^2 + k^2 \sin^2 \frac{1}{2} \vartheta \right)}} \times \\ \times \left\{ \operatorname{arctg} \left[\frac{\mu k \sin \frac{1}{2} \vartheta}{\sqrt{\mu^4 + 4k^2 \left(\mu^2 + k^2 \sin^2 \frac{1}{2} \vartheta \right)}} \right] + \right. \\ \left. + \frac{i}{2} \ln \left[\frac{\sqrt{\mu^4 + 4k^2 \left(\mu^2 + k^2 \sin^2 \frac{1}{2} \vartheta \right)} + 2k^2 \sin \frac{1}{2} \vartheta}{\sqrt{\mu^4 + 4k^2 \left(\mu^2 + k^2 \sin^2 \frac{1}{2} \vartheta \right)} - 2k^2 \sin \frac{1}{2} \vartheta} \right] \right\}. \quad (9.3.55)$$

Этот результат можно подставить в формулу для $T^{(2)}$ на стр. 81. Сходимость здесь также ограничена, вследствие наличия «виртуальных уровней».

Мы закончим этот раздел вычислением по методу Фредгольма до второго порядка. Так как мы имеем дело с трехмерной задачей, то $\operatorname{Spur} \chi_1$ больше не появляется, так что фредгольмовское выражение для f можно записать так:

$$f \simeq f^{(2)} / [1 - (\lambda^2/2) \chi_2],$$

если в этом выражении в числителе и знаменателе сохранены все члены до второго порядка относительно λ^2 . Интеграл для χ_2 есть

$$\chi_2 = \frac{1}{4\pi^4 \mu^2} \iint \frac{dV_p dV_K}{(p^2 - k^2)(K^2 - k^2)(\mu^2 + |\mathbf{K} - \mathbf{p}|^2)^2}.$$

Интеграл по пространству \mathbf{K} пропорционален интегралу L , рассмотренному выше, так что

$$\chi_2 = \frac{1}{4\pi^2 \mu^3} \int \frac{dV_p}{(p^2 - k^2)[p^2 - (k + i\mu)^2]}.$$

Этот интеграл можно сразу свести к контурному интегралу, дающему окончательно

$$\chi_2 = \frac{1}{2\mu^3(\mu - 2ik)}.$$

Следовательно, для малых λ фредгольмовское поперечное сечение второго порядка будет больше, чем соответствующее приближение по Борну.

Трудно определить точность этих результатов, не сделав либо перехода к более высокому порядку приближения, либо точного подсчета по методу фазовых сдвигов. Однако результаты, полученные в одномерной задаче, указывают на то, что необходимо сделать вычисления на один порядок выше, чтобы получить достаточно точные результаты.

Длинноволновое приближение. В борновском приближении потенциал $U(r)$ рассматривается как возмущение, а в качестве невозмущенных волновых функций берутся плоские волны. В других приближениях рассматривают k^2 или $1/k^2$ как параметр возмущения. Первый способ называется

длинноволновым приближением; он будет рассматриваться в этом параграфе; второй годится для коротковолнового предела.

Длинноволновое приближение особенно полезно для решения скалярного уравнения Гельмгольца, так как связывает его решение с решением уравнения Пуассона. Последнее же может быть решено методом разделения переменных, а в двумерном случае методом конформного отображения значительно чаще, чем в 11 координатных системах, в которых можно получить точные решения скалярного уравнения Гельмгольца. Сейчас мы рассмотрим это приложение, а затем перейдем к длинноволновому приближению для уравнения Шредингера.

Мы разложим волновую функцию ψ в следующий степенной ряд:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (9.3.56)$$

В этом разложении предполагается, что ψ — аналитическая функция от k в окрестности точки $k=0$. В случае, если это не так (например, двумерная задача с условиями Дирихле на рассеивающей области), уравнения для φ_n окажутся не имеющими решений. Если возможно определить природу особенности, то всегда можно добавить соответствующие члены в формулу (9.3.56). Форма разложения подсказана разложением плоской волны, к которой должна, конечно, приближаться $\psi(\mathbf{r})$, когда расстояние от рассеивающей области бесконечно возрастает.

Подстановка разложения (9.3.56) в скалярное уравнение Гельмгольца и приравнение нулю коэффициентов при каждой степени k дают

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi_0 &= 0, & \nabla^2 \varphi_1 &= 0, \\ \nabla^2 \varphi_n &= n(n-1) \varphi_{n-2}. \end{aligned} \quad (9.3.57)$$

Граничное условие на поверхности рассеивающей области для каждой из этих функций такое же, как для ψ . Граничное условие на бесконечности более сложное. Так как ψ приближается к

$$\exp(ikz) + \frac{1}{r} \exp(ikr) f(\vartheta, \varphi),$$

то ясно, что

$$\varphi_0(\mathbf{r}) \rightarrow 1 \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Для того чтобы определить граничные условия для остальных φ_i , удобно обратиться к интегральному уравнению для ψ , так как оно включает в себя граничные условия. Чтобы сделать анализ более конкретным, возьмем условия Дирихле: $\psi=0$. Перепишем снова интегральное уравнение (9.3.26):

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikz) + \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ikR}}{R} \frac{\partial \psi}{\partial n_0} dS_0.$$

Подставим сюда разложение (9.3.56) и приравняем опять коэффициенты при одинаковых степенях k . (Заметим, что если бы мы не интересовались разложением в степенной ряд по k , мы могли бы использовать это уравнение в качестве итерационной формулы, подставляя φ_0 вместо ψ , затем подставляя полученный результат вместо ψ , чтобы найти следующее приближение, и т. д.). Мы получаем

$$\varphi_n = z^n + \frac{1}{4\pi} \int \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi_n}{\partial n_0} dS_0 + \frac{1}{4\pi} \sum_{p=1}^n \binom{n}{p} \int R^{p-1} \frac{\partial \varphi_{n-p}}{\partial n_0} dS_0. \quad (9.3.58)$$

Первые три из этих равенств имеют вид

$$\begin{aligned}\varphi_0 &= 1 + \frac{1}{4\pi} \int \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0, \\ \varphi_1 &= z + \frac{1}{4\pi} \int \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi_1}{\partial n_0} dS_0 + \frac{1}{4\pi} \int \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0, \\ \varphi_2 &= z^2 + \frac{1}{4\pi} \int \frac{1}{R} \frac{\partial \varphi_2}{\partial n_0} dS_0 + \frac{2}{4\pi} \int \frac{\partial \varphi_1}{\partial n_0} dS_0 + \frac{1}{4\pi} \int R \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0.\end{aligned}$$

Применяя оператор ∇^2 к этим уравнениям, можно проверить непосредственно, что уравнения (9.3.58) и (9.3.57) идентичны. Асимптотическое поведение при больших r получается, если разложить R^{p-1} по убывающим степеням r , начиная с r^p . Мы принимаем в расчет только члены вплоть до $1/r$, исключая сам член $1/r$, так как он является частью рассеянной волны. Например,

$$\begin{aligned}\varphi_1 &\simeq z + \frac{1}{4\pi} \int \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0 \text{ при } r \rightarrow \infty, \\ \varphi_2 &\simeq z^2 + \frac{r}{4\pi} \int \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0 + \frac{1}{4\pi} \int \left[2 \frac{\partial \varphi_1}{\partial n_0} - \mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{a}_r \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} \right] dS_0.\end{aligned}$$

Здесь \mathbf{a}_r представляет собой единичный вектор в направлении \mathbf{r} , т. е. в направлении рассеяния. Эти условия уточняют наш выбор функций φ_n . Когда последние определены, ряд (9.3.56) можно подставить в (9.3.27), чтобы получить амплитуду рассеяния. Если мы разложим ее по степеням k , то получим

$$f(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \sum_n (-ik)^n \sum_{p=0}^n \frac{(-1)^p}{(n-p)! p!} \int (\mathbf{a}_r \cdot \mathbf{r}_0)^{n-p} \frac{\partial \varphi_p}{\partial n_0} dS_0. \quad (9.3.59)$$

Во втором порядке относительно k имеем

$$\begin{aligned}f(\vartheta, \varphi) &\simeq \frac{1}{4\pi} \left\{ \int \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0 - ik \left[\int \mathbf{a}_r \cdot \mathbf{r}_0 \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0 - \int \frac{\partial \varphi_1}{\partial n_0} dS_0 \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{k^2}{2} \left[\int (\mathbf{a}_r \cdot \mathbf{r}_0)^2 \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0 - 2 \int \mathbf{a}_r \cdot \mathbf{r}_0 \frac{\partial \varphi_1}{\partial n_0} dS_0 + \int \frac{\partial \varphi_2}{\partial n_0} dS_0 \right] \right\}. \quad (9.3.60)\end{aligned}$$

Непосредственно видно, что в пределе, при $k=0$, рассеяние сферически симметрично. Соответствующая амплитуда рассеяния имеет размерность длины и часто называется *длиной рассеяния* a . Поперечное сечение $Q(k=0)$, выраженное через a , равно $4\pi a^2$. Когда r стремится к бесконечности, φ_1 стремится к $z+a$.

Чтобы увидеть, как работают эти формулы, рассмотрим рассеяние на сфере радиуса A , на которой выполняются условия Дирихле. Тогда

$$\varphi_0 = 1 - \frac{A}{r}.$$

Амплитуда рассеяния при $k=0$ равна

$$\frac{1}{4\pi} \int \frac{\partial \varphi_0}{\partial n_0} dS_0 = -A^2 \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial r} \right)_{r=A} = -A.$$

Волновая функция φ_1 должна приближаться к $z-A$ при больших r . Первый член z представляет собой однородный поток на бесконечности, тогда как второй — однородное давление, аналогично случаю φ_0 . Отсюда

$$\varphi_1 = \left(r - \frac{A^2}{r^2} \right) \cos \vartheta - A \left(1 - \frac{A}{r} \right).$$

Подставляя в (9.3.60), мы получаем

$$f(\vartheta, \varphi) = -A + ikA^2 + \dots$$

Функция φ_2 удовлетворяет уравнению

$$\nabla^2 \varphi_2 = 2 \left(1 - \frac{A}{r} \right)$$

и условию

$$\varphi_2 \simeq z^2 - rA + 2A^2 \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Решение φ_2 будет следующим:

$$\varphi_2 = \frac{1}{3} \left(r^2 - \frac{A^5}{r^3} \right) P_2(\cos \vartheta) + \frac{1}{3} r^2 - Ar + 2A^2 - \frac{4}{3} \frac{A^3}{r}.$$

Во втором порядке относительно k имеем

$$f(\vartheta, \varphi) = -A + ikA^2 + \frac{k^2 A^3}{3} (2 - 3 \cos \vartheta). \quad (9.3.61)$$

Мы видим, что все, что необходимо знать для вывода длинноволнового приближения, эквивалентно знанию элементарных решений уравнения Лапласа в системе координат, соответствующей рассеивающей поверхности.

Для иллюстрации общего метода была выбрана трехмерная задача. Он, конечно, также применяется и в одномерном случае, как мы увидим на примере ниже. Мы должны всегда помнить, что предположение об аналитической зависимости ψ от k может оказаться необходимым видоизменить в особых случаях.

Длинноволновое приближение для уравнения Шредингера. Мы рассмотрим движение частицы с массой m и энергией E в сферически симметричном потенциальном поле $V(r)$. Так как длина волны λ и энергия связаны соотношением

$$\frac{k}{2\pi} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

то длинные волны соответствуют низким энергиям частицы. При таких длинах волн изотропная составляющая падающей волны оказывает наиболее сильное действие, поэтому мы сосредоточим свое внимание на уравнении для u_0 [см. (9.3.13)]:

$$u_0'' + [k^2 - U(r)] u_0 = 0, \quad U = \frac{2m}{\hbar^2} V. \quad (9.3.62)$$

(Заметим, однако, что техника и некоторые результаты применимы для любых l .) Будет удобно немного изменить наши обозначения в соответствии с этим. Заменим символ u_0 на u_k , чтобы указать, что мы имеем дело с решениями уравнения (9.3.62) с волновым числом k . В новых обозначениях u_0 представляет собой решение при $k=0$.

Граничные условия для $u_k(r)$ таковы:

$$u_k(0) = 0, \quad u_k(r) \simeq \sin(kr - \eta) \quad \text{при } r \rightarrow \infty,$$

где мы оставили амплитуду на бесконечности неопределенной. Позднее мы выберем ее так, как это будет удобно.

Задача, которую мы ставим здесь, состоит в том, чтобы найти $\eta(k)$, т. е. выразить сдвиг фазы для данного волнового числа k через предельный сдвиг фазы $\eta(0)$. Легко установить величину возмущения первого порядка, сравнивая уравнения для u_0 и u_k . Этот результат основывается на равенстве

$$u_0 u_k'' - u_k u_0'' + k^2 u_k u_0 = 0.$$

Обычный способ непосредственного интегрирования по всей области изменения независимого переменного здесь не применим, так как интегралы

по отдельности расходятся. Мы поэтому введем некоторые функции, которые имеют такое же асимптотическое поведение, как u_0 и u_k . Пусть этими функциями будут w_k и w_0 , причем

$$u_k(r) \simeq w_k(r) \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Здесь функция w_k пропорциональна $\sin(kr - \eta)$ и удовлетворяет уравнению Шредингера, полученному из уравнения для u_k при условии, что потенциал $U = 0$:

$$w_k'' + k^2 w_k = 0.$$

Комбинируя уравнения для w_k и w_0 , получаем уравнение

$$w_0 w_k'' - w_k w_0'' + k^2 w_k w_0 = 0.$$

Вычтем теперь это уравнение из аналогичного уравнения для u_k и u_0 . Интегрирование по r от нуля до бесконечности теперь можно осуществить, так как расходящиеся члены при больших r погашают друг друга. Подстановка граничных условий для u_k и u_0 приводит к уравнению

$$[w_0 w_k' - w_k w_0']_{r=0} = k^2 \int_0^{\infty} (w_k w_0 - u_k u_0) dr. \quad (9.3.63)$$

Мы должны теперь подставить функции w_k и w_0 . Выбирая их амплитуды так, чтобы

$$w_0(0) = w_k(0) = 1,$$

находим

$$w_k = -\frac{\sin(kr - \eta)}{\sin \eta}, \quad w_0 = 1 - \frac{r}{a}, \quad (9.3.64)$$

где

$$1/a = \lim_{k \rightarrow 0} (k \operatorname{ctg} \eta). \quad (9.3.65)$$

Величину a можно вычислить, решая уравнение Шредингера для $k = 0$.

Выражения (9.3.64) подставим теперь в (9.3.63), и это даст следующий результат:

$$-k \operatorname{ctg} \eta = -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^{\infty} (w_k w_0 - u_k u_0) dr. \quad (9.3.66)$$

Из этого *точного* соотношения можно получить формулу для $-k \operatorname{ctg} \eta$, справедливую до первого порядка относительно k^2 , если приближенно заменить w_k на w_0 , а u_k на u_0 :

$$-k \operatorname{ctg} \eta \simeq -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^{\infty} (w_0^2 - u_0^2) dr. \quad (9.3.67)$$

Эта формула очень полезна не только с вычислительной точки зрения, но также с точки зрения анализа экспериментальных данных. Из этих данных можно определить $k \operatorname{ctg} \eta$. Его зависимость от k^2 , т. е. от энергии, при малых k представляется прямой линией. Наклон этой прямой и отрезок, отсекаемый на оси, дают два параметра, определяющие величину a и интеграл $\int (w_0^2 - u_0^2) dr$. Таким образом, результаты эксперимента могут быть объяснены любым потенциалом, который имеет два свободных параметра.

Для того чтобы найти более высокие приближения, нужно в уравнение (9.3.66) подставить более точные выражения для w_k и u_k . Так как дифференциальное уравнение для u_k зависит от k^2 и «падающая» волна при соответствующей нормировке также является функцией от k^2 , то u_k можно разложить в степенной ряд по k^2 , так что

$$u_k = u_0 + \sum_{n=1}^{\infty} k^{2n} \varphi_n. \quad (9.3.68)$$

Дифференциальные уравнения для функций φ_n имеют вид

$$\varphi_n'' - U\varphi_n = -\varphi_{n-1},$$

где $\varphi_0 = u_0$. Функции φ_n при $r=0$ равны нулю. Чтобы выяснить их поведение на бесконечности, мы разложим асимптотическую функцию, определенную в (9.3.64), в степенной ряд по k^2 . Для иллюстрации мы получим граничные условия для φ_1 , первого члена в разложении (9.3.68). Функция w_k выражается формулой

$$w_k = \cos kr - k \operatorname{ctg} \eta \frac{\sin kr}{k}.$$

Мы можем разложить правую часть в ряд до первого порядка относительно k^2 и заменить $k \operatorname{ctg} \eta$ по формуле (9.3.67). Это даст

$$w_k \simeq 1 - \frac{r}{a} + k^2 \left[\frac{r^3}{6a} - \frac{r^2}{2} + r \int_0^{\infty} (w_0^2 - u_0^2) dr \right]. \quad (9.3.69)$$

Следовательно,

$$\varphi_1 \simeq \frac{r^3}{6a} - \frac{r^2}{2} + r \int_0^{\infty} (w_0^2 - u_0^2) dr \quad \text{при } r \rightarrow \infty. \quad (9.3.70)$$

Конкретизация функции φ_1 является теперь полной. Если u_0 и v_0 являются двумя независимыми решениями уравнения для u_0 с вронскианом, равным -1 , то

$$\varphi_1 = C u_0 + v_0 \int_0^r u_0^2 dr_0 - u_0 \int_0^r u_0 v_0 dr_0, \quad (9.3.71)$$

где C должно быть подобрано так, чтобы выполнялось граничное условие (9.3.70). Чтобы определить C , нам надо знать поведение написанных интегралов при больших r . Первый из них можно записать следующим образом:

$$\int_0^r (u_0^2 - w_0^2) dr + \int_0^r w_0^2 dr.$$

При бесконечном r первый из этих двух интегралов является как раз коэффициентом при k^2 в разложении (9.3.67) для $k \operatorname{ctg} \eta$ (и также остается конечным). Следовательно,

$$\int_0^r u_0^2 dr_0 \simeq \int_0^r w_0^2 dr_0 - \int_0^{\infty} (w_0^2 - u_0^2) dr_0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Второй интеграл в (9.3.71) также стремится к конечному значению при неограниченном возрастании r . Чтобы показать это, мы прежде всего

отметим, что для того чтобы интеграл

$$\int_0^{\infty} (\omega_0^2 - u_0^2) dr$$

был конечным, разложение u_0 для больших r не должно содержать членов с r^{-1} и r^{-2} . Этот факт в соединении с требованием, что вронскиан u_0 и v_0 должен равняться -1 , является достаточным для того, чтобы показать, что разложение v_0 для больших r также не содержит членов с r^{-1} и r^{-2} , откуда и вытекает желаемый результат. Следовательно,

$$\begin{aligned} \varphi_1 \simeq C \left(1 - \frac{r}{a}\right) + a \int_0^{\infty} (\omega_0^2 - u_0^2) dr_0 - \\ - \left(1 - \frac{r}{a}\right) \int_0^{\infty} (u_0 v_0 + a - r_0) dr_0 + \frac{r^3}{6a} - \frac{r^2}{2} \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

куда подставлено явное выражение для ω_0 и асимптотическое для v_0 . Сравнивая с граничным условием (9.2.70), мы видим, что

$$C = -a \int_0^{\infty} (\omega_0^2 - u_0^2) dr_0 + \int_0^{\infty} (u_0 v_0 + a - r_0) dr_0.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \varphi_1 = u_0 \left[-a \int_0^{\infty} (\omega_0^2 - u_0^2) dr_0 + \int_r^{\infty} (u_0 v_0 + a - r_0) dr_0 + \right. \\ \left. + ar - \frac{1}{2} r^2 \right] + v_0 \int_0^r u_0^2 dr. \quad (9.3.72) \end{aligned}$$

Раз известно φ_1 , то можно определить следующий член в разложении $k \operatorname{ctg} \eta$:

$$-k \operatorname{ctg} \eta \simeq -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^{\infty} (\omega_0^2 - u_0^2) dr + k^4 \int_0^{\infty} [\omega_0 \chi_1 - u_0 \varphi_1] dr, \quad (9.3.73)$$

где

$$\omega_k = \omega_0 + \sum_{n=1}^{\infty} k^{2n} \chi_n,$$

так что $\varphi_1 \simeq \chi_1$ при $r \rightarrow \infty$. Функция χ_1 дана формулой (9.3.70).

Мы имеем, таким образом, возможность определить следующий член в разложении $k \operatorname{ctg} \eta$ в степенной ряд с помощью квадратур, заключающих в себе только два независимых решения уравнения для u_0 , «радиального» уравнения Шредингера с $k=0$. Этот процесс непосредственно продолжается для получения членов более высокого порядка. Нужно также отметить, что подобный степенной ряд для $k \operatorname{ctg} \eta$ можно получить вблизи любого значения k^2 . Однако сходимость таких рядов, вообще говоря, слабее, чем у рассмотренного выше ряда.

Сходимость. Выясним прежде всего, при каких условиях зависимость величины интеграла в формуле (9.3.66) от энергии будет слабой. Так как подинтегральная функция представляет собою разность между точной и асимптотической формами, то она имеет значение только в той области, где потенциал U отличен от нуля. Отметим, что для сходимости интеграла

необходимо, чтобы потенциал U быстро стремился к нулю при возрастании r . Поэтому предшествующий анализ применим только к короткодействующим потенциалам, а в случае потенциалов с бесконечным радиусом действия, например для кулоновского поля, — неприменим. Действительно, в этом последнем случае поперечное сечение при нулевой энергии бесконечно. Эффективный радиус взаимодействия r_e обычно выбирается следующим:

$$r_e = 2 \int_0^{\infty} (\omega_0^2 - u_0^2) dr, \quad (9.3.74)$$

так как эта формула дает точное значение для потенциала, постоянного при $r < r_e$ и равного нулю при $r > r_e$.

Обращаясь снова к интегралу, мы видим, что его зависимость от энергии определяется зависимостью ω_k и u_k от k внутри той области, где U отлично от нуля, т. е. для $r < r_e$. Если в этой области потенциал очень велик, то изменения в энергии падающей частицы, которые малы по сравнению с этим потенциалом, оказывают лишь небольшое влияние на u_k , так что замена u_k на u_0 приводит к небольшим ошибкам. Таким образом, сходимость будет хорошей, если

$$U_{\text{ср.}} \gg k^2, \quad (9.3.75)$$

где $U_{\text{ср.}}$ есть мера среднего значения потенциала в области $0 < r < r_e$. Если взять эту меру равной

$$\frac{1}{r_e} \int_0^{\infty} u_0^2 U dr,$$

где амплитуда величины u_0 выбрана так, что асимптотическая форма последней ω_0 равна единице при $r = 0$, то неравенство (9.3.75) можно заменить приближенно неравенством

$$k^2 r_e a \ll 1. \quad (9.3.76)$$

Мы рассмотрим теперь зависимость ω_k от k в области $r < r_e$. Из формулы равенств (9.3.64) ясно, что эта зависимость будет слабой, если

$$kr_e \ll 1. \quad (9.3.77)$$

При этих условиях замена ω_k на ω_0 приводит к небольшой ошибке. Мы можем, таким образом, сделать вывод, что сходимость ряда для $k \operatorname{ctg} \eta$ будет быстрой, если потенциал большой и короткодействующий.

Радиус сходимости ряда дается величиной k^2 , при которой $\eta = \pi$, так как тогда $k \operatorname{ctg} \eta$ обращается в бесконечность и ряд должен расходиться. При такой величине энергии поперечное сечение равно нулю. Следовательно, можно ожидать, что ряд для $k \operatorname{ctg} \eta$ будет сходиться вплоть до той энергии, при которой появляется первый минимум полного поперечного сечения. Чтобы выйти за пределы этой энергии, необходимо применить какой-нибудь процесс аналитического продолжения, например преобразование Эйлера.

Коротковолновое приближение; WKBJ-метод¹⁾. Мы сосредоточим наше внимание на одномерных задачах. Наиболее удобной для нашего иссле-

¹⁾ WKBJ — первые буквы фамилий: G. Wentzel, H. A. Kramers, L. Brillouin, H. Jeffreys более или менее независимо открыли этот метод в связи с решением различных задач.

дования является следующая форма уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [k^2 - U(x)]\psi = 0. \quad (9.3.78)$$

Это ограничение очень мало нарушает общность, так как любое дифференциальное уравнение второго порядка, в частности уравнение Штурма — Лиувилля, может быть преобразовано в уравнение Шредингера.

При уменьшении длины волны изменение потенциала $U(x)$ на протяжении длины волны становится все меньше и меньше. Это приводит к мысли, что в пределе можно считать $U(x)$ постоянным на протяжении нескольких длин волн в окрестности x и что в этой области эффективное волновое число $q(x)$ равно

$$q(x) = \sqrt{k^2 - U(x)}.$$

Соответствующим приближенным решением уравнения (9.3.78) будет тогда

$$\psi \simeq \exp[\pm i \int q(x) dx]. \quad (9.3.79)$$

Условие, что q изменяется медленно на протяжении длины волны, необходимое для того, чтобы приближение (9.3.79) имело силу, выражается неравенством

$$\frac{d(\ln q)}{q dx} \ll 1, \text{ или } \left| \frac{\partial U/\partial x}{2(k^2 - U)^{3/2}} \right| \ll 1. \quad (9.3.80)$$

Отсюда непосредственно ясно, что (9.3.79) теряет силу, когда $\partial U/\partial x \gg 1$ или $k^2 - U$ равно нулю.

Потенциальная энергия альфа-частицы в поле атомного ядра может служить примером случаев, в которых коротковолновое приближение не применимо из-за первой из названных причин. Пока частица находится вне ядра, на нее действует электростатическая сила отталкивания, но она очень быстро заменяется большой силой притяжения, как только α -частица попадает внутрь ядра. Коротковолновое приближение можно применить только при таких энергиях α -частицы, при которых ее длина волны мала по сравнению с расстоянием, на котором отталкивание сменяется притяжением.

Метод не применим по второй причине, если U в некоторой точке больше или равно k^2 . Тогда найдется точка, в которой $U = k^2$. По классическим представлениям в этой точке полная энергия падающей частицы равна ее потенциальной энергии и, следовательно, ее кинетическая энергия равна нулю. В следующий момент частица изменит направление движения; поэтому эти точки, в которых $U = k^2$, называются *классическими точками поворота*.

Выясним теперь более точно смысл этих замечаний. Уравнение (9.3.79) наводит на мысль сделать подстановку

$$\psi = \exp[\varphi(x)].$$

Функция $\varphi(x)$ удовлетворяет уравнению

$$(\varphi')^2 + \varphi'' + q^2 = 0. \quad (9.3.81)$$

Это нелинейное уравнение первого порядка для функции φ' , являющейся логарифмической производной от ψ . Его можно решить итерационным методом, предполагая при этом, что φ' — медленно меняющаяся функция. Тогда

$$(\varphi')^2 \simeq -q^2 + \frac{i}{2q} \left[\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{i}{2q} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{i}{2q^2} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 \right].$$

Мы снова видим непригодность этого разложения при $q^2 = k^2 - U$, равном нулю, и при слишком быстрых колебаниях U . Беря первые два члена разложения, получаем

$$\psi \approx q^{-1/2} \exp\left(\pm i \int q dx\right). \quad (9.3.82)$$

Общее решение представляется линейной комбинацией этих двух решений. Особенность при $q = 0$ является, конечно, отражением несостоятельности представленного в виде ряда решения уравнения (9.3.81) при этом значении q .

Приближение (9.3.82) можно использовать в задаче о прохождении волн материи через потенциальный барьер $U(x)$ и отражении их от этого барьера, если энергия падающих частиц всюду больше $U(x)$ (см. рис. 9.13). Если частицы движутся в положительном направлении оси x с амплитудой, равной единице при $x \rightarrow -\infty$, то

$$\psi \approx \sqrt{\frac{k}{q}} \exp\left[i \int_{-\infty}^x (q - k) dx\right] \exp(ikx). \quad (9.3.83)$$

Следовательно, в этом приближении коэффициент прохождения равен единице, а меняется только фаза волны. Это соответствует классическому результату. Мы можем получить следующее приближение для коэффициентов прохождения и отражения, подставив выражение (9.3.83) в формулы (9.3.31) и (9.3.32) ($\lambda = 1$). Более точные выражения для ψ можно получить,

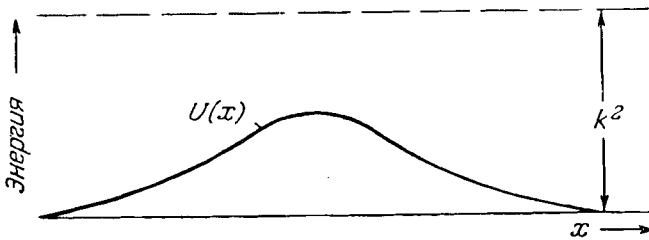


Рис. 9.13. Прохождение волн в случае, когда энергия k^2 везде превышает потенциал $U(x)$.

используя (9.3.83) в качестве исходной пробной функции в итерационном методе, основанном на интегральном уравнении (9.3.30). Можно ожидать, что сходимость такого итерационного метода тем лучше, чем больше k^2 по сравнению с U . Она, конечно, может быть улучшена и с помощью метода Фредгольма. Случай, когда k^2 близко к максимальному значению U , будет рассмотрен позднее [см. уравнение (9.3.117) и далее]. Необходимо указать, что итерационный метод, рассмотренный выше, не приводит к разложению коэффициента отражения по обратным степеням k . Вполне возможно, что коэффициент отражения не является на бесконечности аналитической функцией от k , даже если нам известно, что он там имеет нулевое значение.

Связь с интегральным уравнением. Прежде чем приступить к рассмотрению ситуаций, отличных от той, которая проиллюстрирована на рис. 9.13, стоит показать, как результаты, приведенные выше, можно получить непосредственно из интегрального уравнения. Мы исходим при этом из того замечания, что при k , стремящемся к бесконечности, коэффициент отражения стремится к нулю. Следовательно, если мы рассматриваем волны, падающие слева, как на рис. 9.13, мы должны ожидать, что в

интегральном уравнении для ψ

$$\psi = e^{ikx} + \frac{1}{2ik} \left[e^{ikx} \int_{-\infty}^x e^{-ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 + e^{-ikx} \int_x^{\infty} e^{ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 \right]$$

член, содержащий множитель $\exp(ixk)$, должен быть преобладающим. Опущенная другой интегральный член, имеем

$$\psi \simeq e^{ikx} + \frac{1}{2ik} e^{ikx} \int_{-\infty}^x e^{-ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0.$$

Умножая на $\exp(-ikx)$ и дифференцируя по x , приходим к дифференциальному уравнению

$$\frac{d}{dx} (e^{-ikx} \psi) = \frac{U}{2ik} (e^{-ikx} \psi).$$

Уравнение это можно сразу проинтегрировать:

$$\psi \simeq \exp i \left(kx - \frac{1}{2k} \int_{-\infty}^x U dx \right). \quad (9.3.84)$$

Мы видим, что фаза в этом выражении содержит как раз первые два члена разложения $q(x)$ по обратным степеням k . Следовательно, эта функция ψ приближенно равна той, которая определяется по формуле (9.3.79). Улучшение результата (9.3.84) можно осуществить с помощью итераций, но это приводит к результату, полностью эквивалентному тому, который получается по итерационному методу, указанному после формулы (9.3.83).

Случай изолированных классических точек поворота. Если k^2 меньше максимального значения U , то имеется по крайней мере одна классическая точка поворота. Для потенциала, изображенного на рис. 9.13, их будет две. Анализ, который мы собираемся описать, применим в случае, если имеется только одна точка поворота или если их несколько, но они расположены далеко друг от друга.

Рассмотрим тот случай, когда q имеет один нуль при $x = x_0$; как мы предварительно заметили, при этом приближенное решение (9.3.82) имеет особенность при $x = x_0$. На самом же деле здесь никакой особенности нет, так как точка x_0 является, очевидно, регулярной точкой для дифференциального уравнения (9.3.78), которому удовлетворяет функция ψ . Мы можем легко получить решения в окрестности точки x_0 следующим способом. В окрестности нуля q мы можем положить приближенно

$$q^2 = a^2 (x - x_0),$$

где a — постоянная величина. Соответствующее дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + a^2 (x - x_0) \psi = 0$$

можно решить с помощью функций Бесселя порядка $1/3$. Получается два решения:

$$\psi_+ = \sqrt{x - x_0} J_{1/3} \left[\frac{2}{3} a (x - x_0)^{3/2} \right], \quad (9.3.85)$$

$$\psi_- = \sqrt{x - x_0} J_{-1/3} \left[\frac{2}{3} a (x - x_0)^{3/2} \right]. \quad (9.3.86)$$

Истинное решение ψ должно приближаться к линейной комбинации ψ_+ и ψ_- при x , стремящемся к x_0 .

Чтобы найти эту комбинацию, полезно заменить независимую переменную x другой переменной, которая сводится к $2a(x-x_0)^{3/2}/3$ при $x \rightarrow x_0$, и к $\int q dx$ при больших x . Такой переменной является

$$\omega = \int_{x_0}^x q dx. \quad (9.3.87)$$

При этом мы видим, что функция

$$P = \sqrt{\frac{\omega}{q}} [AJ_{1/3}(\omega) + BJ_{-1/3}(\omega)], \quad (9.3.88)$$

где A и B — постоянные, сводится к линейной комбинации ψ_+ и ψ_- для x , близких к x_0 , и к линейной комбинации решений (9.3.82) при больших x . Это последнее утверждение основано на асимптотических выражениях (5.3.68) для функций Бесселя. Константы A и B определяются граничными условиями. Функция P является, таким образом, приближенным решением дифференциального уравнения для ψ как в окрестности точки x_0 , так и при $x \rightarrow \pm \infty$. В других местах она больше отклоняется от точного решения. Для того чтобы сообразить, как оценить порядок величины ошибки, а также чтобы найти способ улучшения P , мы найдем дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет P . Непосредственное вычисление дает

$$\frac{d^2 P}{dx^2} + \left[q^2 - \frac{r''(x)}{r(x)} \right] P = 0, \quad (9.3.89)$$

где

$$r = \frac{\omega^{1/6}}{\sqrt{q}}. \quad (9.3.90)$$

Отношение r''/r является, таким образом, мерой ошибки. Оно равно нулю при бесконечном x . Оно конечно при $x = x_0$, и так как оно пропорционально второй производной U при $x = x_0$, то ошибка будет малой, если производная потенциала меняется медленно. Ошибка будет большой в любых других нулях q или в точках, где потенциал U меняется быстро.

Форма дифференциального уравнения (9.3.89) приводит к мысли, что если x_0 является единственным нулем q , то r''/r можно рассматривать как возмущение.

Более явно мы запишем это следующим образом:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \left(q^2 - \frac{r''}{r} \right) \psi = - \frac{r''}{r} \psi.$$

Это уравнение может быть преобразовано в интегральное уравнение с помощью функции Грина для оператора

$$\frac{d^2}{dx^2} + q^2 - \frac{r''}{r},$$

которая выражается через два независимых решения, получающихся из формулы (9.3.88). Это интегральное уравнение может затем служить основой для итерационного метода или метода Фредгольма, если это необходимо.

Вернемся теперь к приближению (9.3.88), чтобы установить явный вид его асимптотического поведения. Это нужно для того, чтобы удовлетворить граничным условиям при $\pm \infty$. Рассмотрим сначала случай, показанный на рис. 9.14, где $k^2 > U$ для $x > x_0$. Асимптотическое поведение решения (9.3.88) для $x \gg x_0$ может быть найдено сразу с помощью фор-

мул (5.3.68), дающих асимптотическое поведение бesselевых функций. Получается, что

$$P \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi q}} \left[A \cos\left(\omega - \frac{5}{12}\pi\right) + B \cos\left(\omega - \frac{1}{12}\pi\right) \right] \text{ при } x \gg x_0, k^2 > U. \quad (9.3.91)$$

Если $x \ll x_0$, то q^2 отрицательно, так что и q , и ω являются величинами мнимыми, имеющими точки ветвления при $x = x_0$. Чтобы продолжить наше исследование, мы должны внимательно выбрать ту ветвь q , которую надо использовать. Так как функция P на самом деле однозначна, то годится любая ветвь. Мы выберем $q = \exp(\pi i/2) |q|$ для $x < x_0$. Тогда из

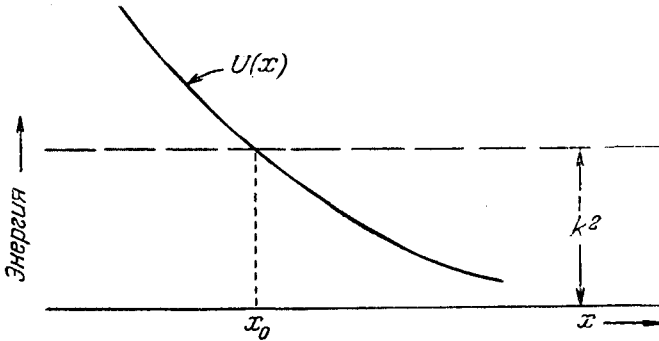


Рис. 9.14. Отражение волны от потенциального барьера.

определения (9.3.87) и линейного приближения для q^2 мы находим, что $\omega = \exp(3\pi i/2) |\omega|$ для $x < x_0$. Формула (5.3.68), дающая асимптотическое поведение бesselевых функций, аргумент которых имеет фазу, заключенную между $\pi/2$ и $3\pi/2$, может быть применена и здесь и дает следующий результат:

$$P \rightarrow \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi q}} [(B - A) e^{|\omega|} + (A e^{\pi i/6} + B e^{-\pi i/6}) e^{-|\omega|}], \quad x \ll x_0, k^2 < U. \quad (9.3.92)$$

Так как ошибка в асимптотическом выражении начинается с члена $\exp(+|\omega|)$, то член $\exp(-|\omega|)$ имеет смысл только тогда, когда B точно равно A .

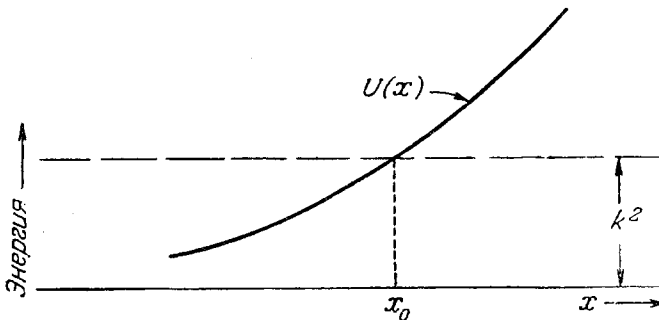


Рис. 9.15. Сшивание решений для возрастающего потенциала.

Рассмотрим теперь случай, представленный на рис. 9.15, где $k^2 < U$ для $x > x_0$. Здесь более удобно употреблять переменную

$$\omega' = \int_x^{x_0} q dx, \quad (9.3.93)$$

так как w' положительно и действительно там, где действительно и положительно q . Соответствующее асимптотическое решение P' имеет вид

$$P' = \sqrt{\frac{w'}{q}} [A' J_{1/3}(w') + B' J_{-1/3}(w')]. \quad (9.3.94)$$

Асимптотическое поведение P' при $x \ll x_0$ можно получить из формулы (9.3.94) заменой w на w' , A на A' и B на B' . В области $x \gg x_0$ можно использовать формулу (9.3.92), заметив, что $|w| = |w'|$.

Рассмотрим теперь, как применяются эти формулы при решении конкретных задач.

WKBJ-метод для связанных состояний. Возьмем снова наш пример из квантовой механики. Потенциал $U(x)$ изображен на рис. 9.16. Для данного приложения существенно только то, что движение будет классически ограничено. Граничные условия состоят в том, что ψ стремится к нулю при x , стремящемся к плюс и минус бесконечности.

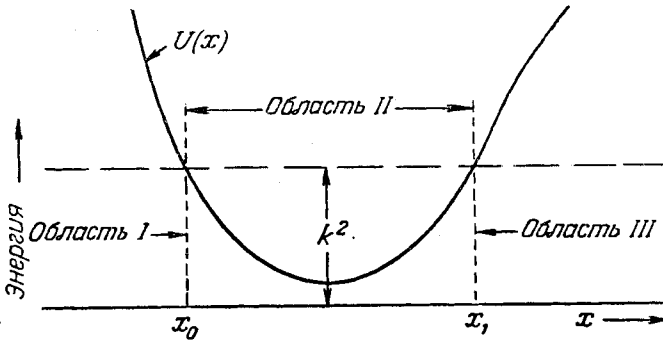


Рис. 9.16. Потенциальная функция для связанного состояния.

Выражение (9.3.92) пригодно для области I . Для того чтобы удовлетворялись граничные условия, мы должны взять $A = B$, так что

$$\begin{aligned} \psi &\simeq A \sqrt{(2/\pi q)} \cos\left(\frac{1}{6} \pi\right) e^{-|w|} \text{ при } x \ll x_0, \\ |w| &= \int_x^{x_0} |q| dx. \end{aligned} \quad (9.3.95)$$

Соответствующий результат для области II получается, если положить $A = B$ в формуле (9.3.91):

$$\begin{aligned} \psi &\simeq 2A \cos\left(\frac{1}{6} \pi\right) \cos\left(w - \frac{1}{4} \pi\right) \text{ при } x \gg x_0, \\ w &= \int_{x_0}^x q dx. \end{aligned} \quad (9.3.96)$$

Мы можем теперь на основе формулы (9.3.94) провести аналогичный анализ связи между волновыми функциями в областях III и II . Снова из-за граничных условий $B' = A'$, так что

$$\begin{aligned} \psi &\simeq A' \sqrt{(2/\pi q)} \cos\left(\frac{1}{6} \pi\right) e^{-|w'|} \text{ при } x \gg x_1, \\ |w'| &= \int_{x_1}^x |q| dx. \end{aligned}$$

В области *II* мы находим, что

$$\psi \simeq 2A' \sqrt{2/\pi q} \cos\left(\frac{1}{6}\pi\right) \cos\left(\omega' - \frac{1}{4}\pi\right) \text{ при } x \ll x_1,$$

$$\omega' = \int_x^{x_1} q dx. \quad (9.3.97)$$

Необходимо, конечно, чтобы решение этой задачи было непрерывным, так что выражения (9.3.96) и (9.3.97) должны совпадать. Переписывая аргумент косинуса в последнем из них в форме

$$\omega' - \frac{1}{4}\pi = \int_{x_0}^{x_1} q dx - \omega - \frac{1}{4}\pi,$$

мы видим, что непрерывности можно достигнуть, положив

$$\int_{x_0}^{x_1} q dx - \frac{1}{4}\pi = \frac{1}{4}\pi + n\pi, \text{ где } n - \text{целое,}$$

или

$$\int_{x_0}^{x_1} q dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi. \quad (9.3.98)$$

Необходимо также выбрать соответствующим образом отношение A/A' .

Выражение (9.3.98) выводится, конечно, в предположении, что x_0 и x_1 отстоят друг от друга настолько, что можно использовать асимптотические выражения для бesselовых функций, встречающихся в формулах (9.3.88) и (9.3.94). Другими словами, волновая функция должна иметь много колебаний в области между x_0 и x_1 , так что для справедливости формулы (9.3.98) необходимым является условие

$$n \gg 1. \quad (9.3.99)$$

Нужно также, конечно, чтобы потенциал менялся медленно.

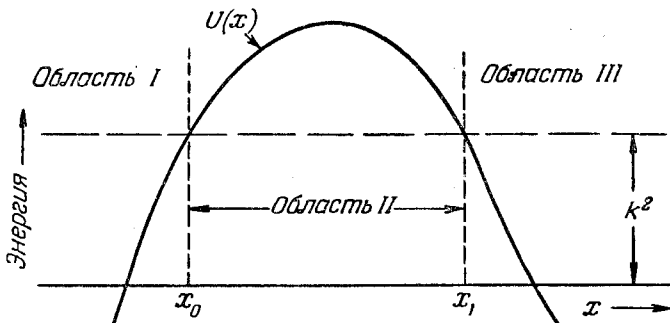


Рис. 9.17. Проникновение волны сквозь потенциальный барьер.

Проникновение сквозь потенциальный барьер. Мы будем здесь рассматривать плоскую волну, падающую на область, в которой потенциал имеет форму, изображенную на рис. 9.17. Пусть волна падает слева. Тогда в области *III* может существовать только прошедшая волна. Ее мы

возьмем в виде

$$\begin{aligned} \phi &\simeq \sqrt{2/\pi q} \exp \left[i \left(\omega - \frac{1}{4} \pi \right) \right] \text{ при } x \gg x_1, \\ \omega &= \int_{x_1}^x q dx. \end{aligned} \quad (9.3.100)$$

Это выражение можно получить из формулы (9.3.91), выбирая соответственно постоянные A и B . В области II формула (9.3.92) дает тогда

$$\phi \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi q}} i e^{|\omega|} \quad (x \ll x_1). \quad (9.3.101)$$

Мы отбросили член, пропорциональный $\exp(-|\omega|)$, в (9.3.92), так как он, вообще говоря, меньше, чем ошибка в члене $\exp|\omega|$. Мы видим, что ϕ будет быстро возрастать при x , значительно меньших, чем x_1 .

Формула для функции ψ в области II также получится из (9.3.92), если ω заменить на ω' , где

$$\omega' = \int_x^{x_0} q dx. \quad (9.3.102)$$

Мы замечаем, что

$$|\omega| = -|\omega'| + \int_{x_0}^{x_1} |q| dx,$$

так что (9.3.101) приобретает вид

$$\phi \simeq \sqrt{2/\pi q} i e^{\alpha} e^{-|\omega'|},$$

где

$$\alpha = \int_{x_0}^{x_1} |q| dx. \quad (9.3.103)$$

Сравнивая с формулой (9.3.92) (с ω , A и B , замененными соответственно на ω' , A' и B'), мы видим, что $A' = B'$, так что

$$\phi \simeq \sqrt{(2/\pi q)} A' \cos \left(\frac{1}{6} \pi \right) e^{-|\omega'|}.$$

Сравнивая с формулой (9.3.101), получаем

$$A' = i e^{\alpha} / \cos \left(\frac{1}{6} \pi \right).$$

В области I пригодной является форма (9.3.91), если в ней заменить ω на ω' . Вставляя туда найденную выше величину A' и переписывая (9.3.91) в виде

$$\sqrt{2/\pi q} \left\{ \alpha \exp \left[i \left(\omega' - \frac{1}{4} \pi \right) \right] + \beta \exp \left[-i \left(\omega' - \frac{1}{4} \pi \right) \right] \right\},$$

мы находим, что

$$\alpha = \beta = i e^{\alpha}.$$

Сравнивая с формулой (9.3.100), мы видим, что коэффициент прохождения T выражается величиной $|1/\beta|^2$, так что

$$T \simeq e^{-2x}. \quad (9.3.104)$$

В силу условия сохранения [см. (9.3.11)] коэффициент отражения R должен быть равен

$$R = 1 - T \simeq 1 - e^{-2x}. \quad (9.3.105)$$

Формулы (9.3.104) и (9.3.105) должны иметь место всегда, когда $x \gg 1$, т. е. $T \ll 1$, конечно, при условии, что потенциалы меняются медленно.

WKBJ-метод для радиальных уравнений. Приведенные выше результаты, в частности формулы (9.3.91) и (9.3.92), невозможно применять непосредственно к радиальному уравнению (9.3.13),

$$u'' + \left[k^2 - U(r) - l(l+1) \frac{1}{r^2} \right] u = 0,$$

так как при $r=0$ оно имеет особенность. Одномерное уравнение Шредингера имеет особенность при $x = \pm \infty$, поэтому, чтобы привести радиальное уравнение к такой же форме, мы введем новое независимое переменное x , так, чтобы точке $r=0$ отвечало $x = -\infty$. В соответствии с этим сделаем преобразование

$$r = e^x.$$

Функция u удовлетворяет тогда уравнению

$$u'' - u' + e^{2x} [k^2 - U(e^x) - l(l+1)e^{-2x}] u = 0,$$

где штрих теперь означает дифференцирование по x . Это еще не одномерное уравнение Шредингера, так как здесь присутствует член с первой производной. Его, однако, можно исключить, сделав следующую замену зависимой переменной:

$$u = e^{x/2} \chi(x). \quad (9.3.106)$$

Функция $\chi(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\chi'' + e^{2x} \left[k^2 - U(e^x) - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-2x} \right] \chi = 0. \quad (9.3.107)$$

Теперь можно применять соотношения (9.3.91) и (9.3.92), [где q^2 должно быть равно коэффициенту при χ в уравнении (9.3.107)]. Функция w равна тогда

$$w = \int_{x_0}^x e^x \sqrt{k^2 - U(e^x) - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 e^{-2x}} dx.$$

Возвращаясь к первоначальной независимой переменной r , получаем

$$w = \int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - U(r) - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \frac{1}{r^2}} dr. \quad (9.3.108)$$

Сравнивая с дифференциальным уравнением для u как функции от r , мы видим, что это уравнение можно решать методом WKBJ для одномерных уравнений, заменив множитель $l(l+1)$ на $\left(l + \frac{1}{2} \right)^2$. В соответствии с этим обозначим подинтегральное выражение в (9.3.108) через q_r . Простым применением этого результата является вычисление энергий связанных состояний. Согласно соотношению (9.3.98), они определяются

формулой

$$\int_{r_0}^{r_1} q_r dr = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi.$$

Величины r_0 и r_1 являются нулями для q_r . Как и раньше, необходимым условием справедливости этой формулы является неравенство $n \gg 1$.

Метод WKBJ для сдвига фаз. WKBJ-приближение можно также использовать для того, чтобы получить оценку сдвигов фаз η_l в задаче рассеяния (см. стр. 67 и 72). Мы рассмотрим случай, когда q_r имеет только один нуль, r_0 , для положительных значений k^2 . Типичная

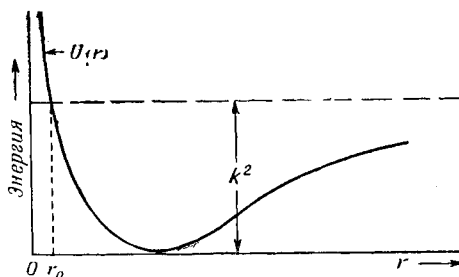


Рис. 9.18. Подсчет сдвигов фаз при решении задачи рассеяния.

кривая показана на рис. 9.18. Мы рассмотрим сначала удовлетворение граничным условиям при $r=0$. Здесь u должно быть равно нулю, так что $\chi(x)$ должно быть равно нулю при $x = -\infty$.

Следовательно, в формуле (9.3.92) мы должны считать $A = B$, так что

$$\chi \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi q_r}} 2A \cos\left(\frac{1}{6}\pi\right) \cos\left[\omega - \frac{1}{4}\pi\right] \quad \text{при } r \gg r_0.$$

Мы получим сдвиг фазы, если сравним аргументы косинуса при наличии и при отсутствии потенциала $U(r)$:

$$\eta_l = \int_{r_1}^{\infty} \sqrt{k^2 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{1}{r^2}} dr - \int_{r_0}^{\infty} \sqrt{k^2 - U(r) - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{1}{r^2}} dr, \quad (9.3.109)$$

Фаза η

l	Точная	WKBJ
0	-9,696	-9,597
1	-7,452	-7,540
2	-4,469	-4,505
3	-1,238	-1,355
4	-0,445	-0,535
5	-0,143	-0,174

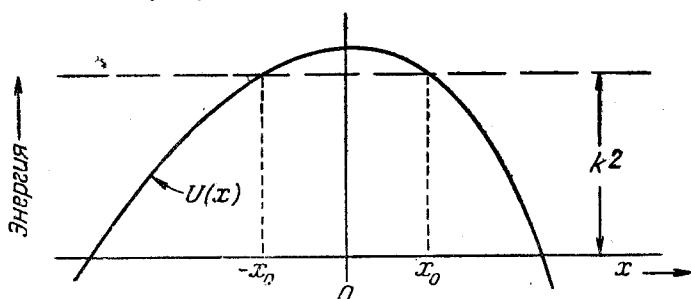
где $r_1 = (l + 1/2)/k$. Можно ожидать, что этот результат применим при больших сдвигах фаз. Малые сдвиги фаз можно оценивать с помощью борновского приближения (9.3.36), так что, используя WKBJ-метод и метод Борна, можно быстро получить оценку сдвигов фаз для всех l . Сравнение некоторых сдвигов фаз, вычисленных по формуле (9.3.109) WKBJ-приближения, с точными дается в приведенной слева таблице¹⁾ (взятой из книги Мотта и Месси, см. библиографию в конце этой главы). Мы видим, что WKBJ-приближение дает прекрасное совпадение с точным значением, когда сдвиг фазы порядка 1 радиана или больше. В то

¹⁾ В этой таблице даны сдвиги фаз для электронов с энергией 54 eV, рассеянных на атомах криптона (см. цитированную книгу Мотта и Месси, стр. 256). — Прим. ред.

же время борновское приближение дает очень хорошие результаты для фаз, значительно меньших единицы.

Случай близко расположенных классических точек поворота. Приведенный выше анализ можно легко распространить на тот случай, когда имеется больше двух точек поворота, если только они лежат так далеко друг от друга, что можно использовать соответствующую асимптотическую форму (9.3.88). Мы рассмотрим теперь случай, когда точки поворота расположены настолько близко, что этого сделать нельзя. Ограничимся случаем, когда только две точки поворота близки друг к другу. Это никоим образом не ограничивает общности наших результатов, так как более сложный случай большего числа близких точек поворота может быть исследован рассмотрением каждой из соседних пар в отдельности.

Мы начнем следующим образом. Для удобства выберем начало координат посередине между нулями, которые будут иметь тогда координаты



Р и с. 9.19. Проникновение через барьер небольшой ширины и высоты.

$\pm x_0$ (см. рис. 9.19). Затем найдем решение дифференциального уравнения в области $-x_0 < x < x_0$. Это решение может быть связано с линейной комбинацией бесселевых функций порядка $1/3$, как в формуле (9.3.88), в случае $x > x_0$, и с другой линейной комбинацией для $x < -x_0$. Затем для каждой комбинации можно легко использовать асимптотические формы и определить в них константы так, чтобы удовлетворялись граничные условия.

В области $-x_0 < x < x_0$ функцию q^2 можно аппроксимировать с помощью параболы:

$$q^2 = b(x - x_0)(x + x_0),$$

так что дифференциальное уравнение приобретает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + b(x^2 - x_0^2)\psi = 0. \quad (9.3.110)$$

Чтобы привести это уравнение к стандартной форме, сделаем подстановку

$$\zeta = b^{1/4}x; \quad (9.3.111)$$

тогда ψ будет удовлетворять уравнению

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + (\zeta^2 - \sqrt{b}x_0^2)\psi = 0.$$

Этот тип уравнения встречается тогда, когда решают скалярное уравнение Гельмгольца методом разделения в параболических координатах; он детально рассматривается в гл. 11. Обращаясь к таблицам, помещенным в конце этой главы, мы видим, что двумя независимыми решениями

в этом случае являются $He(-\sqrt{b}x_0^2, \zeta)$ и $Ho(-\sqrt{b}x_0^2, \zeta)$. Мы будем пользоваться первыми двумя членами в степенных рядах, соответствующих этим функциям, так как предполагаем x_0 достаточно малым. Следовательно,

$$\psi \simeq \alpha \left(1 + \frac{1}{2} bx_0^2 x^2 - \frac{1}{12} bx^4 \right) + \beta x \left(1 + \frac{1}{6} bx_0^2 x^2 - \frac{1}{20} bx^4 \right), \quad (9.3.112)$$

где α и β — константы. Чтобы установить связь с аппроксимацией при помощи бесселевых функций при $x = \pm x_0$, нам необходимо знать величину ψ и ψ' при $x = \pm x_0$. Для $x = x_0$ имеем

$$\begin{aligned} \psi(x_0) &\simeq \alpha \left(1 + \frac{5}{12} bx_0^4 \right) + \beta x_0 \left(1 + \frac{7}{60} bx_0^4 \right), \\ \psi'(x_0) &\simeq \alpha \left(\frac{2}{3} bx_0^3 \right) + \beta \left(1 + \frac{1}{4} bx_0^4 \right). \end{aligned} \quad (9.3.113)$$

Для $x = -x_0$ мы просто заменяем x_0 на $-x_0$ в этом выражении. (Это замечание справедливо также для уравнений, приведенных ниже.) Сходимость этих выражений в основном определяется параметром bx_0^4 . Пусть теперь $x > x_0$; положим

$$\psi = \sqrt{\frac{\omega}{q}} [AJ_{1/3}(\omega) + BJ_{-1/3}(\omega)];$$

поведение ψ вблизи x_0 описывается формулами (9.3.85) и (9.3.86). В таком случае для x , близких к x_0 , имеем

$$\psi \simeq A \frac{\left(\frac{a}{3}\right)^{1/3}}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} (x - x_0) + B \frac{\left(\frac{a}{3}\right)^{-1/3}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)},$$

где $q^2 = a^2(x - x_0)$ вблизи x_0 и $a^2 = 2bx_0$. Сравнение этой формулы с (9.3.112) приводит к соотношениям

$$\begin{aligned} B \frac{\left(\frac{a}{3}\right)^{-1/3}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} &= \alpha \left(1 + \frac{5}{12} bx_0^4 \right) + \beta x_0 \left(1 + \frac{7}{60} bx_0^4 \right), \\ A \frac{\left(\frac{a}{3}\right)^{1/3}}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} &= \alpha \left(\frac{2}{3} bx_0^3 \right) + \beta \left(1 + \frac{1}{4} bx_0^4 \right). \end{aligned} \quad (9.3.114)$$

Если α и β известны, то B и A могут быть определены из предыдущих соотношений. Если же известны A и B , то нужно обратить эти соотношения, что даст

$$\begin{aligned} \alpha &= x_0 \frac{B \left(\frac{a}{3}\right)^{-1/3}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \left(1 + \frac{1}{4} bx_0^4 \right) - \frac{A \left(\frac{a}{3}\right)^{1/3}}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} \left(1 + \frac{7}{60} bx_0^4 \right), \\ \beta &= \frac{A \left(\frac{a}{3}\right)^{1/3}}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} \left(1 + \frac{5}{12} bx_0^4 \right) - \frac{B \left(\frac{a}{3}\right)^{-1/3}}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \left(\frac{2}{3} bx_0^3 \right). \end{aligned} \quad (9.3.115)$$

Чтобы получить результаты, соответствующие x , близким к $-x_0$, мы должны просто заменить в уравнениях (9.3.114) и (9.3.115) x_0 на $-x_0$, а A и B , скажем, на A' и B' .

Мы теперь имеем достаточно данных для того, чтобы вычислить приближенно волновые функции, а также коэффициенты отражения и прохождения для величин k^2 , близких к максимуму $U(x)$. Мы наметим метод в общих чертах, предоставляя его детальный разбор читателю. Предположим, что волна падает слева на барьер, изображенный на рис. 9.19. Тогда граничное условие для $x \gg x_0$ требует наличия там только прошедшей волны. Из асимптотической формы для ψ [см. формулу (9.3.91), которая здесь применима] отношение A к B определяется так, чтобы это граничное условие выполнялось. Затем уравнения (9.3.115) используются для определения α и β . Из уравнения (9.3.114) можно тогда определять A' и B' (вспоминая про замену x_0 на $-x_0$); окончательно асимптотическая форма, имеющая вид

$$\sqrt{\frac{w}{q}} [A' J_{1/3}(w) + B' J_{-1/3}(w)],$$

где

$$w = \int_x^{-x_0} q dx,$$

дает амплитуду падающей волны.

Этот процесс становится невозможным, когда x_0 и $-x_0$ сливаются, так как в этом случае линейное приближение не имеет области применимости. Однако уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + cx^2\psi = 0$$

имеет решение, которое может быть продолжено на большие значения x точно тем же способом, при помощи которого решения (9.3.85) и (9.3.86) привели к формуле (9.3.88). Мы получаем

$$\psi \simeq \sqrt{\frac{w}{q}} [AJ_{1/4}(w) + BJ_{-1/4}(w)]. \quad (9.3.116)$$

Использование этого приближенного решения ни в чем существенном не отличается от использования приближения бесселевыми функциями порядка $\pm 1/3$, так что мы не будем здесь все это повторять.

На этом мы закончим обсуждение WKBJ-метода. Мы хотели бы снова особо отметить требование медленного изменения потенциала U , которое играло существенную роль во всем нашем анализе. Однако даже когда это условие не выполняется, решение, полученное по WKBJ-методу, часто удобно принять за исходную функцию для итерационного процесса, который может быть основан, например, на интегральном уравнении для функции ψ .

Коротковолновое приближение в трехмерном случае. Разобранный выше метод можно применять также к двумерным и к трехмерным задачам. Однако он может быть доведен до конца лишь частично. Мы удовольствуемся тем, что покажем, что уравнение типа уравнения Шредингера

$$[\nabla^2 + q^2(\mathbf{r})]\psi = 0 \quad (9.3.117)$$

для коротких волн сводится к уравнению, которое при акустических и оптических приложениях уравнения (9.3.117) соответствует геометрической оптике, т. е. лучевой теории. Поэтому все диффракционные эффекты, как и можно было ожидать, в этом приближении исчезают. Когда же уравнение (9.3.117) является уравнением Шредингера, описывающим движение частиц, коротковолновое приближение приводит к уравнению Гамильтона — Якоби [см. уравнение (3.2.12) и дальше], которое является

частной формой механики Ньютона. Эти результаты будут использованы главным образом в § 11.4, где предсказания геометрической оптики применяются в качестве первого приближения для волновой теории.

Снова делается основное предположение, что $q(\mathbf{r})$ мало меняется на протяжении длины волны. Говоря более определенно, если q сильно изменяется в некоторой области, то диффракционные эффекты остаются существенными, пока длина волны не станет значительно меньше размеров области. Если бы q была постоянной, то функция

$$\exp[iq(\mathbf{a}_n \cdot \mathbf{r})],$$

где \mathbf{a}_n — единичный вектор в направлении распространения, являлась бы решением уравнения (9.3.117). Для медленно меняющихся q этот результат подсказывает следующую форму решения ψ :

$$\psi = e^{i\omega(\mathbf{r})}. \quad (9.3.118)$$

Подстановка в уравнение (9.3.117) приводит к следующему уравнению для величины ω :

$$(\nabla\omega)^2 - i\nabla^2\omega = q^2.$$

Приближенно для медленно меняющегося q можно в этом уравнении отбросить член $\nabla^2\omega$:

$$(\nabla\omega)^2 = q^2. \quad (9.3.119)$$

Это в точности уравнение Гамильтона — Якоби (3.2.12), где

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$$

и $\omega = S/\hbar$, причем S — интеграл действия. Этим доказывается утверждение, что в предельном случае очень коротких волн уравнение Шредингера переходит в уравнения классической динамики. Как было уже показано в гл. 3, линии, ортогональные к поверхностям $\omega = \text{const}$, образуют множество возможных траекторий.

Чтобы показать, что уравнение (9.3.119) следует из геометрической оптики, нужно только вспомнить принцип наименьшего действия:

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{2mT} dt = \delta \int_{r_0}^{r_1} |\nabla S| ds = 0, \quad (9.3.120)$$

где S — интеграл действия, T — кинетическая энергия, ds — элемент длины, а символ δ означает вариацию. Варьирование совершается при условии, что энергия сохраняется. Уравнение (9.3.119) является следствием этого вариационного принципа. Он является также формулировкой принципа Ферма, как это можно видеть, заменяя $|\nabla S|$ в уравнении (9.3.120) через q согласно уравнению (9.3.119). Мы получаем, отбрасывая постоянный множитель,

$$\delta \int_{r_0}^{r_1} q ds = 0.$$

Следовательно, q пропорционально показателю преломления. Это уравнение является формулировкой того, что правильная траектория луча — это такая траектория, для которой оптическая длина пути стационарна.