9.10. Частица массы m движется в притягивающем сферическом потенциальном поле $U = -V_0 \exp[-(r/a)^2]$. Использовать для вычисления сдвига фазы для $l=0$ пробную функцию $\sin \varkappa r$ (считая $\varkappa$ вариационным параметром) в вариационном принципе (9.4.61). Сравнить результат по порядку величины ka с борновским приближением для V_0, удовлетворяющим условию

$$2mV_0 a^2/\hbar^2 = \frac{1}{4}\pi^2.$$

9.11. В дифференциальном уравнении

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + a^2 q(x)\psi = 0, \quad q = a_1 x + a_2 x^2 + \ldots, \quad a_1 \neq 0,$$

произвести замену независимой переменной на $z = \int\limits_0^x \sqrt{q(x)}\,dx$ и ввести функции

$$Q = q^{-1/4}\frac{d^2 q^{1/4}}{dz^2} = -\left(\frac{5}{36z^2} + \lambda z^{-2/3} + \lambda_0 + \lambda_1 z^{2/3} + \ldots\right)$$

и

$$Q_1(z) = \int\limits_0^z Q(y)\,dy.$$

Показать, что два решения уравнения для ψ выражаются приближенно формулами

$$\psi_{1,2} \simeq q^{-1/4}\exp\left[\pm i\left(az - \frac{Q_1}{2a} \mp \frac{i}{4a^2 Q}\right)\right], \quad z \neq 0,$$

$$\psi_{1,2} \simeq \sqrt{\frac{1}{2}\pi a}\, i^{\pm 5/6}\left\{\exp \mp \left[\frac{1}{2ia}\int\limits_0^\infty \left(Q + \frac{5}{36z^2}\right)dz\right]\right\} z^{1/6}\zeta H_{1/3}^{(1,2)}(\eta),$$

где

$$\zeta = \sqrt{z^{2/3} + \lambda\varkappa^{-2} - \frac{1}{5}\lambda_1\varkappa^{-2}\xi^2}, \quad \eta = \varkappa\left(\xi + \frac{1}{5}\lambda_1\varkappa^{-2}\xi^2\right)^{3/2},$$

$$\varkappa^2 = a^2 + \lambda_0, \quad \xi = z^{2/3} + \lambda\varkappa^{-2}.$$

Применить эти формулы к функции Ганкеля $H_p(p \sec\lambda)$.

Таблица приближенных методов

Связанные состояния. Объемные возмущения. Уравнение, подлежащее решению:

$$\nabla^2\psi + (k^2 - U_0 - \lambda U)\psi = 0.$$

Невозмущенная задача $\nabla^2\varphi_n + (k_n^2 - U_0)\varphi_n = 0$, которая может быть решена точно, имеет собственные функции φ_n и собственные значения k_n^2 (предполагаемые здесь невырожденными; об эффектах вырождения см. стр. 623). Различные приближенные ряды для ψ содержат матричные элементы возмущающего потенциала

$$U_{mn} = \int \ldots \int \bar{\varphi}_m U \varphi_n dx_1 \ldots dx_N.$$

Итерационно-пертурбационные ряды. Первое, второе и a-е приближения для ψ и собственного значения k^2 выражаются формулами [см. (9.1.15)]

$$\psi^{(1)} = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \left(\frac{U_{pn}}{k_n^2 - k_p^2} \right) \varphi_p,$$

$$(k^2)^{(1)} = k_n^2 + \lambda U_{nn},$$

$$\psi^{(2)} = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}\varphi_p}{k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_p^2} + \lambda^2 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{pq}U_{qn}\varphi_p}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)},$$

$$(k^2)^{(2)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np}U_{pn}}{k_n^2 - k_p^2},$$

$$\psi^{(a)} = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}\varphi_p}{(k^2)^{(a-1)} - k_p^2} + \ldots + \lambda^a \sum_{pq \ldots \neq n} \frac{U_{pq} \ldots U_{zn}\varphi_p}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2) \ldots (k_n^2 - k_z^2)}$$

$$(k^2)^{(a)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np}U_{pn}}{(k^2)^{(a-2)} - k_p^2} + \ldots +$$

$$+ \lambda^a \sum_{pq \ldots \neq n} \frac{U_{np}U_{pq} \ldots U_{zn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2) \ldots (k_n^2 - k_z^2)}$$

Рассмотрение сходимости проведено на стр. 11 и 13.

Ряды Финберга. Формулы, исключающие повторение матричных элементов в последовательных рядах, не отличаются от написанных выше для первых двух порядков. Приближение a-го порядка имеет вид [см. (9.1.37)]

$$\psi^{(a)} = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}\varphi_p}{(k^2)^{(a-1)} - (\varkappa^2)_{np}^{(a-1)}} + \ldots +$$

$$+ \lambda^a \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq np \\ \ldots}} \frac{U_{pq} \ldots U_{zn}\varphi_p}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2) \ldots (k_n^2 - k_z^2)}$$

$$(k^2)^{(a)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np}U_{pn}}{(k^2)^{(a-2)} - (\varkappa^2)_{np}^{(a-2)}} + \ldots +$$

$$+ \lambda^a \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq np \\ \ldots}} \frac{U_{np}U_{pq} \ldots U_{zn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2) \ldots (k_n^2 - k_z^2)},$$

где

$$(\varkappa^2)_{np}^{(m)} = k_p^2 + \lambda U_{pp} + \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq}U_{qp}}{(k^2)^{(m-2)} - (\varkappa^2)_{npq}^{(m-2)}} + \ldots +$$

$$+ \lambda^m \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq \\ \ldots}} \frac{U_{pq}U_{qr} \ldots U_{zp}}{(k^2 - k_q^2)(k^2 - k_r^2) \ldots (k^2 - k_z^2)},$$

$$(\varkappa^2)_{npq}^{(m)} = k_q^2 + \lambda U_{qq} + \lambda^2 \sum_{r \neq npq} \frac{U_{qr}U_{rq}}{(k^2)^{(m-2)} - (\varkappa^2)_{npqr}^{(m-2)}} + \ldots .$$

Эти формулы обычно сходятся для значений λ, меньших того, при котором наступает вырождение.

Формула Фредгольма. Следующие формулы сходятся при всех значениях λ. Они снова не отличаются от прежних для первых двух порядков аппроксимации. Формулы для следующего порядка в случае двумерных и трехмерных задач имеют вид

$$\psi^{(3)} = \varphi_n + \sum_{p\neq n} \varphi_p \left\{ \frac{\lambda U_{pn}}{(k^2)^{(2)} - k_p^2} + \lambda^2 \sum_{q\neq n} \frac{U_{pq}U_{qn} - U_{pn}U_{qq}}{[(k^2)^{(1)} - k_p^2]\,[(k^2)^{(1)} - k_q^2]} + \right.$$

$$\left. + \lambda^3 \sum_{qr\neq n} \frac{U_{pq}U_{qr}U_{rn} - U_{qq}U_{pr}U_{rn} - \frac{1}{2} U_{pn}(U_{qr}U_{rq} - U_{qq}U_{rr})}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2)} \right\} \times$$

$$\times \left\{ 1 - \lambda \sum_{q\neq n} \frac{U_{qq}}{(k^2)^{(1)} - k_q^2} - \frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{qr\neq n} \frac{U_{qr}U_{rq} - U_{qq}U_{rr}}{(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2)} \right\}^{-1},$$

$$(k^2)^{(3)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \sum_{p\neq n} U_{np} \left\{ \frac{\lambda^2 U_{pn}}{(k^2)^{(1)} - k_p^2} + \right.$$

$$\left. + \lambda^3 \sum_{r\neq n} \frac{U_{pr}U_{rn} - U_{rr}U_{pn}}{(k_n^2 - k_r^2)(k_n^2 - k_p^2)} \right\} \left\{ 1 - \lambda \sum_{p\neq n} \frac{U_{pp}}{k_n^2 - k_p^2} \right\}^{-1}.$$

Общие формулы даны на стр. 26—28.

Эти формулы расходятся в одномерном случае, где след $\sum U_{rr} \times \times (1 - \delta_{rn})/(k_n^2 - k_r^2)$ расходится, хотя высшие следы сходятся. В этом случае [см. формулу (9.1.67)] мы просто отбрасываем расходящийся ряд и используем формулы так, как если бы он был равен нулю.

Вариационный принцип для связанных состояний. Вариационный принцип для k^2, соответствующий уравнению $(\nabla^2 + k^2 - U_0 - \lambda U)\psi = 0$, имеет вид

$$[k^2] = \int \tilde{\varphi}(-\nabla^2 + U_0 + \lambda U)\varphi\, dv \Big/ \int \tilde{\varphi}\varphi\, dv, \qquad \delta[k^2] = 0$$

[см. уравнение (9.4.8)]. Функция φ — пробная функция, удовлетворяющая тем же граничным условиям, что и ψ, и снабженная параметрами для изменения ее формы внутри границ; $\tilde{\varphi}$ — сопряженная функция, удовлетворяющая уравнению и граничным условиям, сопряженным к φ (см. т. I, стр. 814). Величина $[k^2]$, рассматриваемая как функция параметров, имеет стационарное значение (которое мы будем называть «минимумом», хотя оно может быть и максимумом и точкой перегиба), при котором φ равна ψ_0 — собственной функции низшего состояния, а $[k^2]$ равно k_0^2 — соответствующему собственному значению уравнения. Чтобы получить k_1^2 и ψ_1, мы добавляем условие, что φ ортогональна к ψ_0, и находим новое стационарное значение $[k^2]$ и т. д.

Вместо «минимизации» $[k^2]$ мы можем использовать вариационное выражение для величины возмущающего потенциала λ:

$$[\lambda] = \int \tilde{\varphi}(\nabla^2 - U_0 + k^2)\varphi\, dv \Big/ \int \tilde{\varphi} U \varphi\, dv, \qquad \delta[\lambda] = 0.$$

Тогда мы находим наименьшее значение λ, для которой k^2 является собственным значением.

Мы можем также использовать функцию Грина G_u, решение уравнения

$$(\nabla^2 - U_0 - \lambda U)\, G_u(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0) = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0),$$

и «минимизировать» выражение

$$[k^2]=\int \tilde{\varphi}\varphi\, dv \Big/ \int\int \tilde{\varphi}(\mathbf{r})\, G_u(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\, \varphi(\mathbf{r}_0)\, dv\, dv_0.$$

Или можно использовать функцию Грина G_k — решение уравнения

$$(\nabla^2+k^2-U_0)\, G_k(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)=-4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0);$$

тогда нужно «минимизировать» выражение для λ

$$[\lambda]=\int \tilde{\varphi} U\varphi\, dv \Big/ \int\int \tilde{\varphi}(\mathbf{r})\, U(\mathbf{r})\, G_k(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\, U(\mathbf{r}_0)\, \varphi(\mathbf{r}_0)\, dv\, dv_0.$$

Если существует решение ψ_0 уравнения $(\nabla^2+k^2-U_0)\,\psi=0$ для выбранного значения k^2, то мы должны «минимизировать» выражение

$$[J]=\left[\int \tilde{\varphi} U\psi_0\, dv+\int \tilde{\psi}_0 U\varphi\, dv\right]^2 \Big/ \left[\int \tilde{\varphi}\, U\varphi\, dv-\lambda\int\int \tilde{\varphi} U G_k U\varphi\, dv\, dv_0\right]$$

[см. формулу (9.4.19)].

Вариационно-итерационный метод. Мы преобразуем дифференциальное уравнение в интегральное при помощи данной выше функции Грина G_k. Интегральное уравнение для последовательных приближений имеет вид

$$\psi^{(n)}(\mathbf{r})=\lambda\int G_k(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,\psi^{(n-1)}(\mathbf{r}_0)\, U(\mathbf{r}_0)\, dv_0.$$

При желании можно положить $\psi^{(0)}=\varphi_n$.

Величина λ является тогда собственным значением и вычисляется как функция от k^2. Если нужно, то после выполнения вычислений результаты можно обратить и получить k^2 как функцию от λ. Положив

$$[m,\ n]=\int \psi^{(m)} U\psi^{(n)}\, dv,$$

мы можем показать, что если оба оператора $(\nabla^2-k^2-U_0)$ и U положительно определены, то последовательность $\lambda^{(n)}\geqslant\lambda^{(n+1/2)}\geqslant\lambda^{(n+1)}\geqslant\ldots$, где

$$\lambda^{(n)}=[n,\ n-1]/[n,\ n] \quad \text{и} \quad \lambda^{(n+1/2)}=[n,\ n]/[n,\ n+1],$$

монотонно сходится к наименьшему собственному значению λ_0, а соответствующие функции $\psi^{(n)}$ — к соответствующей собственной функции ψ_0 [формулы ускорения сходимости приведены в (9.1.84) и (9.4.108)].

Если параметр k^2 близок к k_n^2, мы можем положить $\psi^{(0)}=\varphi_n$, и в этом случае

$$\psi^{(1)}=\sum_p \frac{U_{pn}\varphi_p}{k^2-k_p^2}, \qquad \psi^{(2)}=\sum_{pq}\frac{U_{pq}U_{qn}\varphi_p}{(k^2-k_p^2)(k^2-k_q^2)},$$

$$\lambda^{(1/2)}=U_{nn}\Big/\sum_p \frac{U_{np}U_{pn}}{k^2-k_p^2},$$

$$\lambda^{(1)}=\sum_p \frac{U_{np}U_{pn}}{k^2-k_p^2}\Big/\sum_{pq}\frac{U_{np}U_{pq}U_{qn}}{(k^2-k_p^2)(k^2-k_q^2)}$$

и т. д. Приложения см. на стр. 34 и 143.

Возмущения граничных условий. Если невозмущенная задача состоит в решении уравнения $(\nabla^2+k_n^2)\,\varphi_n=0$ в области R, ограниченной поверхностью S, на которой заданы однородные условия Неймана $\partial\varphi/\partial n=0$, то решение уравнения $(\nabla^2+k^2)\,\psi=0$ в R при граничных условиях

$$\frac{\partial\psi}{\partial n}+\mu F(S)\,\psi=0 \quad \text{на поверхности } S$$

может быть выражено через φ_n и k_n^2, если μ достаточно мало. Мы положим $\mu=\lambda$ и просто подставим вместо λU_{mn} в приведенные выше приближенные формулы матричные элементы

$$f_{mn}=\oint \bar{\varphi}_m(S)\,F(S)\,\varphi_n(S)\,dS,$$

где интегрирование распространено на всю поверхность S, ограничивающую R.

Если μ велико, то наиболее удобной невозмущенной системой является множество решений уравнения $(\nabla^2+k^2)\chi=0$, удовлетворяющих на S условиям Дирихле $(\chi=0)$, с собственными функциями χ_n и собственными значениями k_n^2. Мы полагаем $1/\mu=\lambda$ и подставляем

$$q_{mn}=\frac{1}{k_m k_n}\oint \frac{\partial\chi_m}{\partial n}\,\frac{1}{F(S)}\,\frac{\partial\chi_n}{\partial n}\,dS$$

вместо λU_{mn} в различные пертурбационные формулы. По поводу частных случаев и изучения сходимости см. § 9.2.

Мы можем также для получения ψ и k^2 использовать вариационный принцип; мы «минимизируем» выражение

$$[k^2]=\left[\int(\nabla\tilde{\varphi})\cdot(\nabla\varphi)\,dv-\mu\oint\tilde{\varphi}F\varphi\,dS\right]\Big/\int\tilde{\varphi}\varphi\,dv$$

[см. формулу (9.4.26)], где поверхностный интеграл берется по всей поверхности S.

Возмущения формы границы. Допустим, что область R, ограниченная поверхностью S, целиком содержится в области R', ограниченной поверхностью S', причем для области R' можно вычислить точные решения φ_n, удовлетворяющие условиям Неймана на S', и соответствующие собственные значения k_n^2. Пертурбационные ряды для решения уравнения $(\nabla^2+k^2)\psi=0$, удовлетворяющего однородным условиям Неймана на S, получаются при использовании векового определителя

$$|N_{mn}(k^2-k_m^2)-A_{mn}|=0,$$

где

$$A_{mn}=\int\frac{\partial\bar{\varphi}_m}{\partial n}\varphi_n\,dS\quad(\text{по } S)$$

и

$$N_{mn}=\int\bar{\varphi}_m\varphi_n\,dv\quad(\text{по } R)\;=\frac{A_{mn}-A_{nm}}{k_n^2-k_m^2},$$

$$N_{nn}=\int\left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial(k^2)}\frac{\partial\bar{\varphi}_n}{\partial n}-\bar{\varphi}_n\frac{\partial^2\varphi_n}{\partial n\,\partial(k^2)}\right)_{k=k_n}dS\quad(\text{по } S).$$

Тогда с точностью до второго порядка ψ равно нулю вне R, а внутри R выражается формулой

$$\psi\simeq\varphi_n+\sum_{p\neq n}\left[\frac{A_{pn}-(k^2-k_p^2)N_{pn}}{(k_n^2-k_p^2+A_{nn})N_{pp}-A_{pp}}\right]\varphi_p+$$

$$+\sum_{pq\neq n}\frac{[A_{pq}-(k_n^2-k_p^2)N_{pq}]\,[A_{qn}-(k_n^2-k_q^2)N_{qn}]}{[(k_n^2-k_p^2)N_{pp}-A_{pp}]\,[(k_n^2-k_q^2)N_{qq}-A_{qq}]}\varphi_p.$$

Соответствующее собственное значение:

$$k^2\simeq k_n^2+\frac{A_{nn}}{N_{nn}}+\sum_{p\neq n}\frac{A_{np}\,[A_{pn}-(k_n^2-k_p^2)N_{pn}]}{N_{nn}\,[(k_n^2-k_p^2)N_{pp}-A_{pp}]}.$$

Выражения для более высоких порядков приближения обычно расходятся (см. стр. 56—59). Если граничными условиями служат однородные условия Дирихле ($\psi=0$ на S, $\varphi_n=0$ на S'), то обычно сходятся только выражение первого порядка для ψ и второго порядка для k^2:

$$\psi \simeq N_{nn}\varphi_n + \sum_{p\neq n} \frac{A_{np}\varphi_p}{k_p^2-k_n^2} \text{ в } R; \qquad \psi=0 \quad \text{вне} \quad R;$$

$$k^2 \simeq k_n^2 - \frac{A_{nn}}{N_{nn}} + \sum_{p\neq n} \frac{k_n^2 A_{pn}^2}{N_{nn}k_p^2(k_p^2-k_n^2)}.$$

Пертурбационные формулы для рассеяния. Плоская падающая волна $e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}$ рассеивается на конечной области R вблизи начала координат. Асимптотическое выражение для рассеянной волны на расстоянии r в направлении $\mathbf{k}_s$ от области R имеет вид

$$\psi_s \simeq -T(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i)(e^{ikr}/4\pi r) \quad \text{при} \quad r\to\infty,$$

где k — модуль волнового вектора $\mathbf{k}_i$ падающей волны, а также волнового вектора $\mathbf{k}_s$ рассеянной волны.

Если рассеяние вызвано объемными возмущениями, такими, например, как потенциал U в уравнении Шредингера $(\nabla^2+k^2-U)\psi=0$, то интегральное уравнение для ψ имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} - \int \frac{e^{ikR}}{4\pi R} U(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)\,dv_0$$

и

$$T(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i) = \int e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0} U(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)\,dv_0, \qquad R=|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|.$$

Последовательные *борновские* приближения (9.3.38) получаются после выполнения следующего ряда интегрирований:

$$\psi^{(n)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} - \int \frac{e^{ikR}}{4\pi R} U(\mathbf{r}_0)\psi^{(n-1)}(\mathbf{r}_0)\,dv_0, \qquad \psi^{(0)} = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}},$$

$$T^{(n)}(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i) = \int e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r})\psi^{(n-1)}(\mathbf{r})\,dv, \qquad T^{(1)} = \int e^{i(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_s)\cdot\mathbf{r}} U\,dv.$$

Последовательные борновские приближения для фактора углового распределения T могут быть получены при помощи трансформации Фурье потенциальной функции

$$U(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i) = \int e^{i(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_s)\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r})\,dv = T^{(1)}(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i)$$

[см. формулу (9.3.45)],

$$T^{(2)}(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i) = U(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i) - \int \frac{U(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{K})\,U(\mathbf{K}\,|\,\mathbf{k}_i)}{(2\pi)^3(K^2-k^2)}\,dv_K \quad \text{и т. д.}$$

Если рассеяние обусловлено каким-нибудь возмущающим объектом вблизи начала координат с поверхностью S, на которой должны быть выполнены граничные условия, то интегральное уравнение для ψ приобретает вид

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} \begin{cases} +\displaystyle\int \frac{e^{ikR}}{4\pi R}\frac{\partial\psi}{\partial n_0}\,dS_0; & \psi=0 \text{ на } S \\ -\displaystyle\int \psi(S_0)\frac{\partial}{\partial n_0}\left(\frac{e^{ikR}}{4\pi R}\right)dS_0; & \dfrac{\partial\psi}{\partial n}=0 \text{ на } S \end{cases},$$

где нормальная производная берется по направлению внутрь поверхности. Последовательные приближения для ψ и T, начинающиеся с

$$T^{(1)}(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i) = i \oint \frac{(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0^s)}{(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{n}_0^s)} e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s)\cdot \mathbf{r}_0^s}\, dS,$$

где интегрирование производится по поверхности S (верхнее скалярное произведение относится к случаю $\psi = 0$, нижнее — к случаю $\partial\psi/\partial n = 0$ на S), называются приближениями *Кирхгофа* [см. (9.3.39)].

Вариационные принципы для задач рассеяния. При объемном возмущении, вызванном потенциальной функцией $U(\mathbf{r})$, отличной от нуля вблизи начала координат, вариационный принцип для фактора углового распределения T получается «минимизацией» выражения

$$[T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i)] = \frac{\int \tilde{\varphi} U e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}\, dv \int \varphi U e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}}\, dv}{\int \tilde{\varphi} U \varphi\, dv + \int\int \tilde{\varphi} U\, (e^{ikR}/4\pi R)\, U\varphi\, dv\, dv_0}$$

[см. формулу (9.4.69)], где $\tilde{\varphi}$ — сопряженная к φ волновая функция, соответствующая плоской волне, падающей в направлении $-\mathbf{k}_s$ и рассеянной в направлении $-\mathbf{k}_i$. Для рассеяния на поверхности S, на которой $\partial\psi/\partial n = 0$, вариационное выражение, подлежащее «минимизации», имеет вид

$$[T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i)] = \frac{\oint (\mathbf{n}\cdot\mathbf{k}_i)\, \tilde{\varphi} e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}^s} dS \oint (\mathbf{n}_0\cdot\mathbf{k}_s)\, \varphi e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0^s} dS_0}{\oint\oint \tilde{\varphi}(S) \frac{\partial^2}{\partial n\, \partial n_0}\left(\frac{e^{ikR}}{4\pi R}\right) \varphi(S_0)\, dS\, dS_0}$$

[см. (9.4.83)]. Если $\psi = 0$ на S, то мы «минимизируем» выражение

$$[T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i)] = -\frac{\oint \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial n} e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}^s} dS \oint e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0^s} \frac{\partial\varphi}{\partial n_0}\, dS_0}{\oint\oint \frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial n} \frac{e^{ikR}}{4\pi R} \frac{\partial\varphi}{\partial n_0}\, dS\, dS_0}$$

[см. (9.4.85)]. Каждое из этих интегрирований производится по S.

Рассеяние на сферически-симметричных объектах. Сумма падающей и рассеянной волн может быть разложена по сферическим гармоникам

$$\psi = e^{ikr\cos\vartheta} + \psi_s = \sum (2m+1)\, i^m P_m(\cos\vartheta) \frac{u_m(r)}{kr},$$

где

$$e^{ikr\cos\vartheta} = \sum (2m+1)\, i^m P_m(\cos\vartheta)\, j_m(kr).$$

Функции j_m — сферические функции Бесселя [см. формулу (11.3.42)]. Если рассеиватель изображается потенциалом U, функции $u_m(r)$ должны удовлетворять уравнению $u_m'' + \{k^2 - [m(m+1)/r^2] - U(r)\}\, u_m = 0$ и стремиться к нулю при $r \to 0$. Для больших значений r для них имеет место асимптотическое представление

$$u_m(r) \simeq e^{-i\eta_m} \cos\left[kr - \frac{1}{2}\pi(m+1) - \eta_m\right],$$

где η_m называется сдвигом фазы. Поэтому рассеянная волна имеет следующую асимптотическую форму (ϑ — угол между $\mathbf{k}_s$ и $\mathbf{k}_i$):

$$\psi_s(\mathbf{r}) \simeq f(\vartheta)\, e^{ikr}/r, \qquad f(\vartheta) = -(1/4\pi)\, T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i),$$

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{k} \sum (2m+1)\, e^{-i\eta_m} \sin(\eta_m)\, P_m(\cos\vartheta).$$

Дифференциальное и полное поперечные сечения рассеяния равны тогда соответственно [см. формулы (9.3.6) и (9.3.8)] $\sigma = |f(\vartheta)|^2$ и

$$Q = \int \sigma \, d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum (2m+1) \sin^2 \eta_m.$$

Интегральное уравнение для u_m имеет вид

$$u_m(r) = krj_m(kr) + kr \left[n_m(kr) \int_0^r r_0 j_m(kr_0) U(r_0) u_m(r_0) \, dr_0 + \right.$$
$$\left. + j_m(kr) \int_r^\infty r_0 n_m(kr_0) U(r_0) u_m(r_0) \, dr_0 \right]$$

[см. уравнение (9.3.34)], а сдвиг фазы определяется соотношением

$$\operatorname{tg} \eta_m = \int_0^\infty r_0 j_m(kr_0) U(r_0) u_m(r_0) \, dr_0.$$

Первое борновское приближение получается заменой $u_m(r)$ на $j_m(kr)$ в этих уравнениях; высшие приближения получаются итерацией.

Можно также вывести вариационные принципы для u_m и η_m. Мы их напишем сначала для u_0 и η_0; нетрудно вывести соответствующие выражения и для $m > 0$. Первый из этих принципов использует функцию v_0, решение уравнения $v_0'' + k^2 v_0 = 0$, которая имеет такой же сдвиг фазы, как и u, при $r \to \infty$ и которая стремится к 1, когда $r \to 0$. Иными словами,

$$v_0(r) = -\sin(kr - \eta_0)/\sin \eta_0; \qquad u_0(r) \underset{r \to \infty}{\simeq} \operatorname{cosec} \eta_0 \cdot \sin(kr - \eta_0).$$

Первый принцип требует «минимизации» величины

$$[-k \operatorname{ctg} \eta_0] = \int_0^\infty \left[\left(\frac{d\varphi}{dr} \right)^2 - \left(\frac{dv}{dr} \right)^2 - k^2 (\varphi^2 - v^2) + \varphi^2 U(r) \right] dr,$$

где φ — функция сравнения, которая должна удовлетворять следующим граничным условиям:

$$\varphi \to \begin{cases} 0 & \text{при } r \to 0, \\ -\operatorname{cosec} \eta_0 \cdot \sin(kr - \eta_0) & \text{при } r \to \infty. \end{cases}$$

Вариационный принцип, в котором η не появляется неявно внутри интеграла, использует пробную функцию w, причем $w = v - u$; $w(0) = 1$; $w \to 0$ $(r \to \infty)$. Мы находим вид функции w, для которой «минимизируется»

$$[k \operatorname{ctg} \eta_0] = (1/2A) [B + \sqrt{B^2 - 4AC}],$$

где (см. формулы (9.4.56))

$$A = \int_0^\infty U \frac{\sin^2(kr)}{k^2} \, dr,$$

$$B = 1 + \frac{1}{k} \int_0^\infty U \sin(2kr) \, dr - \frac{2}{k} \int_0^\infty Uw \sin(kr) \, dr,$$

$$C = \int_0^\infty \left\{ \left[\left(\frac{dw}{dr} \right)^2 - (k^2 - U) w^2 \right] + U [\cos^2(kr) - 2w \cos(kr)] \right\} dr.$$

Другой вариационный принцип, годный для любого значения m, приведен ниже. Пробная функция φ_m, равная u_m, если «минимизируется» выражение

$$[k \operatorname{ctg} \eta_m] = \frac{\int\limits_0^\infty U\varphi_m^2\,dr - 2k\int\limits_0^\infty rn_m(kr)\varphi_m U \int\limits_0^r r_0 j_m(kr_0)\varphi_m U\,dr_0\,dr}{\left[\int\limits_0^\infty rj_m(kr)\,U(r)\,\varphi_m(r)\,dr\right]^2},$$

стремится к нулю при $r \to 0$, как r^{m+1}, и остается конечной при $r \to \infty$. Точная форма φ_m при больших r несущественна, так как подинтегральные выражения там исчезают из-за наличия множителя $U(r)$. Правильный вид функции u_m может быть получен (если это нужно) подстановкой лучшей формы φ_m в интегральное уравнение для u_m, данное на стр. 162.

ЛИТЕРАТУРА

Теория возмущений, разобранная в этой главе, развивалась главным образом в связи с эволюцией квантовой механики.

Книги и статьи на эту тему, содержащие разбор некоторых аспектов теории возмущений:

Ландау Л. и Лифшиц Е., Квантовая механика, ч. I, М.—Л., ГИИТЛ, 1948.
Шифф Л., Квантовая механика, М., Издат. иностр. лит., 1957.
Condon E. U., Morse P. M., Quantum Mechanics, chap. 4, New York, 1929.
Feenberg E., A Note on Perturbation Theory, Phys. Rev., 74, 206 (1948).
Feshbach H., On Feenberg's Perturbation Formula, Phys. Rev., 74, 1548 (1948).
Kemble E. C., The Fundamental Principles of Quantum Mechanics, chap. 11, New York, 1937.
Mott N. F., Sheddon I. N., Quantum Mechanics and Its Applications, Oxford, New York, 1948.

Сведения об эффектах изменения формы границы:

Brillouin L., Perturbation by Boundary Deformation as a Problem of Proper Values, Comptes rendus, 204, 1863 (1937).
Cabrera, Perturbation of Boundary Conditions, Cahiers phys., 31, 24 (1948).
Feshbach H., On the Perturbation of Boundary Conditions, Phys. Rev., 65, 307 (1944).
Feshbach H., Harris C. M., The Effect of Non-uniform Wall Distributions of Absorbing Material on the Acoustics of Rooms, J. Acoust. Soc. Am., 18, 472 (1946).
Wasserman G. D., On the Theory of Boundary Perturbations, Phil. Mag., 37, 563 (1946).
Wasserman G. D., On Perturbation Problems Associated with Finite Boundaries, Proc. Cambridge Phil. Soc., 44, 251 (1947).

Дальнейшее изучение техники приближенных вычислений в вопросах рассеяния и диффракции:

Мотт и Месси, Теория атомных столкновений, М., Издат. иностр. лит., 1951.
Condon E. U., Quantum Mechanics of Collision Processes, Rev. Modern Phys., 3, 43 (1931).
Dalitz R. H., On Higher Born Approximations in Potential Scattering, Proc. Roy. Soc., A206, 509 (1951).
Jost R., Pais A., On the Scattering of a Particle by a Static Potential, Phys. Rev., 82, 840 (1951).
Morse P. M., Quantum Mechanics of Collision Processes, Rev. Modern Phys., 4, 577 (1932).

Ссылки на WKBJ-метод:

Bohm D., Quantum Theory, chap. 12, Prentice-Hall, New York, 1951.
Kemble E. C., The Fundamental Principles of Quantum Mechanics, стр. 90 и далее, New York, 1937.
Langer R. E., On the Connection Formulas and the Solutions of the Wave Equation, Phys. Rev., 51, 669 (1937).

Использование вариационного метода для вычисления дискретных собственных состояний:

Коллатц Л., Численные методы решений дифференциальных уравнений, М. Издат. иностр. лит., 1953.
Рэлей, Теория звука, М.—Л., Гостехиздат, 1955.
Dushman S., Elements of Quantum Mechanics, chap. 11, New York, 1938.
Hylleraas E. A., New Calculation of the Energy of Helium in the Ground State, Z. f. Physik, **54**, 347 (1929).
Pauling L., Wilson E. B., Introduction to Quantum Mechanics, New York, 1935.

Использование вариационного метода для вычисления рассеяния:

Blatt J. M., Jackson J. D., On the Interpretation of Neutron-proton Scattering Data by the Schwinger Variational Method, Phys. Rev., **76**, 18 (1949).
Hulthen L., The Variational Principle for Continuous Spectra, X Cong. Math. Scand., Copenhagen, 1946.
Hulthen L., Sturm—Liouville Problem Connected with Continuous Spectrum, Ark. Math., Ast. Phys., **35A**, 1 (1948).
Levine H., Schwinger J., On the Theory of Diffraction by an Aperture in an Infinite Plane Screen, Phys. Rev., **75**, 1423 (1949).
Mott N. F., Sneddon I. N., Quantum Mechanics and Its Applications, Oxford, New York, 1948.
Schwinger J., On the Charge Independence of Nuclear Forces (Appendix), Phys. Rev., **78**, 138 (1950).

Сведения об итерационно-вариационном методе:

Hestenes M. R., Karush W., Method of Gradients for Calculation of Characteristic Roots of Real Symmetric Matrix, Natl. Bur. Standards, J. Research, **47**, 45 (1951).
Kellogg O. D., On the Existence and Closure of Sets of Characteristic Functions, Math. Ann., **86**, 14 (1922).
Lanczos C., An Iteration Method for the Solution of the Eigenvalue Problem, Nat. Bur. Standards, J. Research, **45**, 255 (1950).
Svartholm N., The Binding Energies of the Lightest Atomic Nuclei, Hakan Ohlssons, Lund, 1945 (dissertation).