УДК 530.1:51-72

ФУНКЦИЯ ГРИНА УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

В. Ю. Гавриш, П. В. Асвинова

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого», Республика Беларусь

Задача столкновения двух частиц в классической механике с учетом прицельного расстояния и скорости частиц решается известными методами. В квантовой механике меняется сама постановка вопроса, поскольку понятие траектории, а с нею и прицельного расстояния теряет смысл.

В работе продемонстрирована процедура получения дифференциального сечения с последующим переходом расчета функции Грина. В работе авторы, используя методы функции комплексного переменного, получают выражения для амплитуды рассеяния плоской волны.

Связь дифференциального сечения с амплитудой рассеяния. Известно [1], [2], что свободная частица массы m описывается плоской волной. Применяя нормировку, при которой плотность потока в волне равна скорости частицы $\vec{\upsilon}$, получаем:

$$\psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}. \qquad (1)$$

Рассеянные частицы будут описываться расходящейся сферической волной:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + f\left(\vec{k}',\vec{k}\right)\frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\vec{r}} \qquad (2)$$

с функцией $f\left(\vec{k}',\vec{k}\right)$, которую называют амплитудой рассеяния.

Элемент дифференциального сечения рассеяния $d\sigma$, соответствующий элементу телесного угла $d\Omega$, определяется выражением

$$d\sigma = \frac{dn}{j_{in}}. \qquad (3)$$

Число частиц dn пропорционально плотности потока рассеянных частиц j_{out}:

$$dn = j_{out}\vec{r}^{\,2}\ d\Omega, \qquad (4)$$

используя выражение для плотности тока вероятности:

$$j(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\ \nabla\psi - \psi\ \nabla\psi^*\right) \qquad (5)$$

после некоторых вычислений для падающей (1) и рассеянной волны (2) из общего выражения (3) следует выражение для дифференциального сечения:

$$d\sigma = \left|f\left(\vec{k}',\vec{k}\right)\right|^2 d\Omega. \qquad (6)$$

Из соотношения (6) следует, что задача о вычислении сечения рассеяния сводится к поиску амплитуды рассеяния $f\left(\vec{k}', \vec{k}\right)$.

Функция Грина свободной частицы. Свободная частица описывается уравнением Шредингера:

$$\widehat{H}_0\ \psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}) = E\ \psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}), \tag{7}$$

где $\widehat{H}_0$ – гамильтониан. Для свободной частицы гамильтониан представлен оператором кинетической энергии:

$$\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \tag{8}$$

Волновая функция, соответствующая выражению (8), определяется формулой (1).

В случае наличия оператора взаимодействия $\widehat{V} = V(\vec{r})$ уравнение Шредингера принимает вид

$$\left(\widehat{H}_0 + \widehat{V}\right)\psi(\vec{r}) = E\ \psi(\vec{r}). \tag{9}$$

Для простоты будем полагать, что взаимодействие исчезает на больших расстояниях от силового центра, т. е. $V(\vec{r} \to \infty) = 0$. Перепишем (9) в виде

$$\left(\widehat{H}_0 - E\right)\psi(\vec{r}) = -\ \widehat{V}\ \psi(\vec{r}), \tag{10}$$

решение которого будем проводить методом функции Грина. Для этого перейдем от дифференциального уравнения Шредингера (10) к эквивалентному интегральному уравнению:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \int G_0(E, \vec{r}, \vec{r}')\, V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')d\vec{r}', \tag{11}$$

где $G_0(E, \vec{r}, \vec{r}')$ – функция Грина, соответствующая оператору $\widehat{H}_0$ и удовлетворяющая уравнению

$$\left(E - \widehat{H}_0\right)G_0(E, \vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{12}$$

с дельта-функцией Дирака $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ [3]. Легко убедиться, что, если $G_0(E, \vec{r}, \vec{r}')$ является функцией Грина, соответствующей оператору $\widehat{H}_0$, то справедливо так называемое спектральное разложение или спектральное представление функции Грина [2]:

$$G_0(E, \vec{r}, \vec{r}') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi^0_n(\vec{r})\psi^{*0}_n(\vec{r}')}{E_0 - E_n}, \tag{13}$$

которое в случае непрерывного спектра оператора $\widehat{H}_0$ определяется интегралом вида

$$G_0(E, \vec{r}, \vec{r}') = \int \frac{\psi^0_\chi(\vec{r})\psi^{*0}_\chi(\vec{r}')}{E_0 - E_n}\frac{d\vec{\chi}}{(2\pi)^3}. \tag{14}$$

Выполняя несложные преобразования, связанные, в частности, с интегрированием по направлениям вектора $\vec{\chi}$, приходим к выражению

$$G_0(E,\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\frac{1}{i|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\int \frac{e^{i|\vec{\chi}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{\frac{2mE_0}{\hbar^2}-|\vec{\chi}|^2}\frac{d\vec{\chi}}{(2\pi)^3}, \tag{15}$$

где было учтено, что $|\vec{k}| = \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}}$.

Выражение (15) не определяет функции Грина однозначно. Рассмотрим два способа обхода полюсов: добавим к положительной вещественной величине E_0 малую добавку $\pm i\varepsilon$. Соответствующие выражения для функции Грина обозначим индексами (+) или (–):

$$G_0^{(\pm)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') = \lim_{\varepsilon\to 0} G_0(E \pm i\varepsilon, \vec{r},\vec{r}\,'), \tag{16}$$

которое с помощью техники вычетов [4] приводит к

$$\begin{aligned} G_0^{(+)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}; \\ G_0^{(-)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{-i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}. \end{aligned} \tag{17}$$

Случай расходящейся волны соответствует $G_0^{(+)}(E,\vec{r},\vec{r}\,')$; с учетом (11) приходим к

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \int \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')d\vec{r}\,', \tag{18}$$

откуда путем сравнения с общим выражением (2) получаем, что амплитуда рассеяния определяется функцией Грина (17) и явным видом оператора взаимодействия $\hat{V} = V(\vec{r})$.

Решение интегрального уравнения (18) даже в случае простейшего оператора решают приближенно методом итераций, поэтому указанные расчеты в силу громоздких выражений здесь приводиться не будут.

Таким образом, в работе получен явный вид функции Грина уравнения Шредингера. Полученные выражения могут быть использованы для решения задач рассеяния на кулоновском потенциале, а также для других часто используемых потенциалов в физических приложениях.

Литература

1. Ландау, Л. Д. Курс теоретической физики : в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2008. – Т. 3. Квантовая механика. – 800 с.
2. Савельев, И. В. Основы теоретической физики / И. В. Савельев. – СПб. : Лань, 2005. – Т. 2. Квантовая механика. – 432 с.
3. Владимиров, В. С. Уравнения математической физики / В. С. Владимиров. – М. : Наука, 1967. – 436 с.
4. Лаврентьев, М. А. Методы теории функций комплексного переменного / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. – М. : Наука, 1973. – 749 с.