ЖЭТФ, 2016, том 150, вып. 3 (9), стр. 456–460

РЕЗОНАНСНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ РАССЕЯНИИ МЕДЛЕННЫХ ЧАСТИЦ НА ЭКРАНИРОВАННЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ

*Ю. М. Брук**, *А. Н. Волощук*

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 февраля 2016 г.

Рассматриваются парциальные резонансные ситуации для рассеяния медленных частиц с ненулевыми моментами на короткодействующих экранированных потенциалах типа Юкавы и Букингема. Обсуждается задача о рассеянии электронов на водородном атоме, помещенном в плазменную среду. Построена общая схема резонансов в приближении Пайса.

DOI: 10.7868/S0044451016090030

1. ВВЕДЕНИЕ

В этой статье мы обсуждаем особенности и процедуру приближения Пайса [1] для вычисления характеристик резонансных фаз δ_l^{res} рассеяния на короткодействующих потенциалах при низких энергиях рассеивающихся частиц и при ненулевых орбитальных моментах. Одновременно рассматривается ситуация для подобных же вычислений для парциальных фаз δ_l^{PRE} (эффектов) Рамзауэра (ПЭР) [partial Ramsauer effects (PRE)]. В случае резонансов фазы $\delta_l^{res} = \pi/2 \pmod \pi$, для ПЭР-фазы $\delta_l^{PRE} = n\pi$, здесь n — целые числа, поэтому последние не дают вклада в сечение рассеяния.

Уравнение Пайса, полученное вариационным способом еще в 1949 г. ([1], см. также [2, 3]), имеет вид

$$\frac{2l+1-\dfrac{2}{\pi}\,\delta_l}{2l+1-\dfrac{4}{\pi}\,\delta_l}\,\delta_l = -\frac{\pi}{2}\int\limits_0^\infty U(r) J_\mu^2(kr) r\,dr. \qquad (1)$$

Здесь l — момент рассеивающейся частицы, δ_l — фаза рассеяния, $U(r)$ — потенциал, k^2 — энергия частицы, $J_\mu(kr)$ — бесселева функция, в индекс которой также входит δ_l: $\mu = l + 1/2 - 2\delta_l/\pi$.

Мы пользуемся системой единиц, в которой постоянная Планка $\hbar$ и удвоенная масса частицы равны единице. Проинтегрированный центробежный член в гамильтониане включен в левую часть уравнения (1).

В общем виде при произвольных $U(r)$, k^2 и l интегрофункциональное уравнение (1), конечно, не решается аналитически. По-видимому, это было причиной того, что это уравнение мало известно авторам учебников и других пособий по квантовой механике. Вместе с тем в квантовой механике широко используется борновское приближение. При достаточно малых значениях δ_l уравнение (1) переходит в соответствующее уравнение в борновском приближении.

Принципиальное различие приближений Пайса и Борна состоит в том, что последнее, будучи следствием теории возмущений, годится только для малых значений δ_l и уж во всяком случае не может описывать резонансные ситуации. Пайсовским приближением можно эффективно пользоваться и для резонансных случаев. Отысканию возможных решений при $\delta_l \sim 1$ (или $\pi/2$) при $ka \ll 1$ (a — эффективный радиус потенциала) и посвящена эта работа. В следующем разделе мы сформулируем также общую схему классификации допустимых значений фаз δ_l^{res} и δ_l^{PRE}. Конкретно будем обсуждать потенциалы с экранированием и с возможной поляризацией (на примерах потенциалов Юкавы и Букингема).

Следует сделать еще одно важное замечание. Мы не учитываем ширину резонансов, предполагая их «острыми». Для наших, по сути качественных, рассуждений ширина резонансов (скажем, отличие $\pi/2$ от более точных значений) роли не играет, хотя нетрудно написать и более сложные формулы.

* E-mail: yubruk@gmail.com

Уравнение Пайса при $ka \ll 1$ позволяет находить и нерезонансные формулы. Некоторая логарифмическая процедура для этого описывается в [3, 4]. Другие примеры решения уравнения Пайса и численные вычисления приведены в работах [5, 6]. Во многих случаях сравнения численных результатов с приближением Борна и «точным» решением уравнения Шредингера показывают, что приближение Пайса лучше борновского (если последнее применимо).

2. КЛАССИФИКАЦИЯ РЕЗОНАНСОВ И ПЭР-ФАЗ В ПАЙСОВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Прежде всего отметим, что сама методика получения уравнения (1) не позволяет изучать фазы для s-рассеяния. В этом случае вычисления с фазой δ_0 s-рассеяния должны проводиться независимо и дополнять расчеты для парциальных волн с $l \neq 0$. Но s-рассеяние изучено хорошо, и его описание есть практически во всех курсах квантовой механики.

Процедура вывода уравнения (1), предложенная Титцем [2] и безусловно согласующаяся с оригинальным выводом Пайса [1], предполагает выполнение для задачи рассеяния условий

$$l(l+1) - b^2 > 0, \quad b^2 = \frac{4}{\pi^2}\left[-\delta_l^2 + \pi\left(l+\frac{1}{2}\right)\delta_l\right] \quad (2)$$

для каждого $l \neq 0$. Кроме того, должно выполняться условие сходимости интеграла в (1) — положительность индекса функции Бесселя:

$$\delta_l < \frac{\pi}{2}\left(l + \frac{1}{2}\right). \quad (3)$$

Для каждого l можно вместо (2) написать явно квадратное неравенство для δ_l и потребовать, чтобы величина δ_l была неотрицательным числом (так должно быть при рассеянии с $U < 0$). Тогда из (2) и (3) получится набор неравенств

$$\delta_1 \leqslant \frac{\pi}{2}, \quad \delta_2 \leqslant \pi, \quad \delta_3 \leqslant \frac{3\pi}{2}, \ldots \quad (4)$$

Но это означает, что при $l = 1$ может быть только один резонанс $\pi/2$, при $l = 2$ может быть один резонанс $\pi/2$ и одна фаза $\delta_2^{PRE} = \pi$, при $l = 3$ есть три интересующие нас точки: резонансы $\pi/2$ и $3\pi/2$ и одна фаза $\delta_3^{PRE} = \pi$ и т. д.

Заметим, что здесь происходит чередование для фаз: в интервале $(0, \pi/2)$ есть резонанс, в интервале $(\pi/2, \pi)$ новые резонансы не появляются, но возникает фаза $\delta_2^{PRE} = \pi$, в интервале $(\pi, 3\pi/2)$ появляется резонанс $3\pi/2$ и т. д. Эта закономерность может быть прослежена и дальше при $l > 3$.

Таким образом решается задача о перечислении всех возможных значений δ^{res} и δ^{PRE} для всех l.

Эту особенность мы уже рассматривали раньше для случая потенциала прямоугольной сферической ямы [3], но оказывается, что это же справедливо для любых допустимых потенциалов в приближении Пайса.

3. ПОТЕНЦИАЛ ЮКАВЫ

Рассмотрим рассеяние на потенциале Юкавы

$$U(r) = -e^{-\lambda r}\frac{Z}{r}. \quad (5)$$

Будем изучать задачу о рассеянии при условии $kr \ll \ll 1$. Тогда для квадрата функции Бесселя $J_\mu^2(kr)$ имеем асимптотику

$$J_\mu^2(kr) = \left(\frac{kr}{2}\right)^{2\mu}\frac{1}{\Gamma^2(\mu+1)}. \quad (6)$$

Здесь опять $\mu = l + 1/2 - 2\delta_l/\pi$, $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Подставим теперь в (1) выражения (5) и (6) и используем известную формулу

$$\int\limits_0^\infty u^{\alpha-1}e^{-\beta u}du = \frac{1}{\beta^\alpha}\,\Gamma(\alpha). \quad (7)$$

После соответствующих замен переменных получим решение уравнения (1):

$$\frac{2l+1-2\delta_l/\pi}{2l+1-4\delta_l/\pi}\,\delta_l = \frac{\pi}{2}\left(\frac{Z}{\lambda}\right)\frac{1}{2^{2\mu}}\left(\frac{k}{\lambda}\right)^{2\mu}\frac{\Gamma(2\mu+1)}{\Gamma^2(\mu+1)}. \quad (8)$$

Это решение годится для любых $l \neq 0$. Выпишем таблицу значений всех «играющих» параметров для разных l и интересующих нас фаз. Для возможных сравнений с другими задачами в таблицу включены параметры

$$\mu = l + \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi}\,\delta_l, \quad s = l + 1 - \frac{2}{\pi}\,\delta_l. \quad (9)$$

Для первых трех парциальных волн имеем значения, приведенные в табл. 1. Формулу (8) можно переписать, заменив μ на $s - 1/2$. Подставляя параметры из каждой строки табл. 1 в (8), получим связи между параметрами, определяющими соответствующие значения δ_l^{res} и δ_l^{PRE} (табл. 2).

Таблица 1

№	l	δ_l	s	μ	2μ
1	1	$\pi/2$	1	$1/2$	1
2	2	$\pi/2$	2	$3/2$	3
3	2	π	1	$1/2$	1
4	3	$\pi/2$	3	$5/2$	5
5	3	π	2	$3/2$	3
6	3	$3\pi/2$	1	$1/2$	1

Таблица 2

№	l	δ_l	Условия для резонансов и ПЭР-фаз
1	1	$\pi/2$	$(Z/\lambda)(k/\lambda) = \pi,$
2	2	$\pi/2$	$(Z/\lambda)(k/\lambda)^3 = \pi,$
3	2	π	$(Z/\lambda)(k/\lambda) = 3\pi,$
4	3	$\pi/2$	$(Z/\lambda)(k/\lambda)^5 = \dfrac{9\pi}{8},$
5	3	π	$(Z/\lambda)(k/\lambda)^3 = \dfrac{5\pi}{2},$
6	3	$3\pi/2$	$(Z/\lambda)(k/\lambda) = 6\pi$

Таблица 3

№	l	δ_l	Условия для резонансов и ПЭР-фаз
1	1	$\pi/2$	$(U_0R^2)(kR) = 3\pi$
2	2	$\pi/2$	$(U_0R^2)(kR)^3 = 30\pi$
3	2	π	$(U_0R^2)(kR) = 9\pi$
4	3	$\pi/2$	$(U_0R^2)(kR)^5 = 945\pi$
5	3	π	$(U_0R^2)(kR)^3 = 75\pi$
6	3	$3\pi/2$	$(U_0R^2)(kR) = 18\pi$

Структура табл. 1, 2 и нумерация строк в них выбраны здесь так, чтобы было соответствие с подобными таблицами для других потенциалов. Таковы, например, таблицы для прямоугольной ямы. Потенциал ямы $U(r) = -U_0$ для $r < R$ и $U(r) = 0$ для $r \geqslant R$. Здесь U_0 — глубина потенциала, R — радиус (ширина) ямы. Вычисления для ямы элементарны, а вместо табл. 2 построена аналогичная ей табл. 3. Ее можно использовать для возможных качественных сравнений с обсуждаемыми в этой статье задачами. Таблица 1, разумеется, не изменяется для всех потенциалов.

4. ПОТЕНЦИАЛ БУКИНГЕМА

Потенциал Букингема

$$U(r) = -\frac{e^2\alpha_p}{2(r^2+r_0^2)^2}\exp\left(-\frac{2r}{r_D}\right)\left(1+\frac{r}{r_D}\right)^2 \quad (10)$$

является удобным модельным потенциалом, описывающим рассеяние электрона на поляризованном атоме, находящемся в плазменной среде. В него входят параметры α_p — поляризуемость атома и r_D — дебаевский радиус. Этот потенциал и определяемые им характеристики рассеяния обсуждались, например, в работах [7, 8].

Величина r_0 определяет характерный размер, на котором происходит эффективное обрезание потенциала на малых расстояниях. Этот малый параметр вводится для обеспечения сходимости соответствующих интегралов.

Слово «атом» выше можно в определенном смысле заменить словами «кластер» или «комплекс» частиц, на котором также может происходить в плазменной среде рассеяние заряженных частиц. Потенциал Букингема применяется во многих задачах: например, при изучении рассеяния на ионах в задаче об образовании отрицательно заряженных ионов водорода, при расчетах кинетических коэффициентов и псевдопотенциалов.

Нам кажется достаточно интересной в целом неплохо разработанная теория образования отрицательных ионов водорода в солнечной и звездной атмосферах. Присутствие таких ионов во внешних слоях Солнца и звезд существенно влияет, например, на прозрачность их атмосфер [9–11]. Поэтому задача о резонансном рассеянии на потенциалах типа потенциала Букингема представляется достаточно актуальной. Оказывается, что разумные качественные результаты можно получить даже при решении задач рассеяния подобных одночастичным.

Наши дальнейшие рассуждения аналогичны уже высказанным выше. При малых энергиях (точнее при $kr \ll 1$) опять заменим в интеграле в формуле (1) квадрат бесселевой функции асимптотикой (6). После подстановки (6) и (10) в (1) получим

$$\frac{2l+1-\dfrac{2}{\pi}\delta_l}{2l+1-\dfrac{4}{\pi}\delta_l}\,\delta_l = \frac{\pi}{2}\,\frac{e^2\alpha_p}{2}\left(\frac{k}{2}\right)^{2\mu}\frac{1}{\Gamma^2(\mu+1)}\times$$

$$\times\int\limits_0^\infty \frac{r^{2\mu}}{(r^2+r_0^2)^2}\exp\left(-\frac{2r}{r_D}\right)\left(1+\frac{r}{r_D}\right)^2 r\,dr. \quad (11)$$

Решив это уравнение, получим фазы δ_l при заданных $U(r)$ и k.

Дальше нас будут интересовать только резонансные ситуации. Поэтому, чтобы не выписывать общих громоздких формул, мы переформулируем задачу. Во-первых, приведем правую часть выражения (11) к безразмерному виду с помощью подстановок

$$y = \frac{kr}{kr_D}, \quad y_0 = \frac{r_0}{r_D}. \tag{12}$$

Во-вторых, будем рассматривать обратную задачу, вводя вместо δ_l в (11) резонансные значения $\pi/2$, $\pi, 3\pi/2, \ldots$ (при соответствующих l). Тогда мы получим соотношения между потенциалом и энергией, при которых могут реализоваться фазы δ_l^{res} и δ_l^{PRE}. Фактически мы составим таким образом табл. 4, подобную табл. 2 и 3. Функции Φ_1, Φ_2, Φ_3 — безразмерные функции параметра y_0, об их вычислении скажем ниже. Сейчас обратим внимание на формальное подобие структур равенств в строках в табл. 2–4. Величина $e^2\alpha_p/r_D^4$ играет роль U_0 в табл. 3, а r_D^2 подобно R^2, kr_D подобно kR. Степени, в которых в соответствующих строках в табл. 3 и 4 входят kr_D и kR совпадают. Функции Φ_i имеют вид

$$\Phi_i(y_0) = \int_0^\infty \frac{e^{-2y}(1+y)^2 y^{2i}}{(y^2+y_0^2)^2}\, dy, \quad i = 1, 2, 3. \tag{13}$$

Такие интегралы можно вычислить точно и получить $\Phi_i = \Phi_i(y_0)$. Но соответствующие формулы довольно громоздки, они приведены в [12] (см. том 1, стр. 263, ф-ла (11)) и в [13] (см. стр. 27, разд. 1.4). Вряд ли имеет смысл их здесь выписывать.

Нет никакой проблемы с вычислениями $\Phi_i(y_0)$ на компьютере. Но после этого приходится вспомнить, что $y_0 = r_0/r_D$. Дебаевский радиус r_D определяется температурой T и плотностью n плазменной среды:

$$r_D \simeq \sqrt{\frac{T}{4\pi e^2 n}}. \tag{14}$$

Что касается r_0, то можно считать физический размер обрезания порядка размера атома.

В задаче о рассеянии электрона на атоме водорода иногда принимается $r_0 = 1.45a_B$, a_B — боровский радиус (в обычных единицах $\hbar^2/m_e e^2 = 0.529 \times 10^{-8}$ см). Для иллюстрации приведем все же результаты компьютерного вычисления $\Phi_1(y_0)$. График такой функции удобно построить в координатах $\{y_0, y_0\Phi_1(y_0)\}$. Он представляет собой «гиперболоподобную» кривую с отрицательной производной. По горизонтальной оси для вычисленной картинки y_0 меняется от 0.1 до 1, по вертикальной оси $y_0\Phi_1(y_0)$ меняется от 0.48 (при $y_0 = 0.1$) до 0.1 (при $y_0 \simeq 1$).

Выпишем координаты нескольких точек графика:

$$y_0\Phi_1 = 0.35 \quad \text{при} \quad y_0 = 0.2,$$
$$y_0\Phi_1 \simeq 0.23 \quad \text{при} \quad y_0 = 0.4,$$
$$y_0\Phi_1 \simeq 0.17 \quad \text{при} \quad y_0 = 0.6.$$

Разумнее, впрочем, считать, что r_D обычно на много порядков превышает r_0, поэтому y_0 совсем малое число. По существу нам надо сказать еще несколько слов о физических параметрах, входящих явно или неявно в потенциал Букингема. Если обсуждать рассеяние на атоме водорода, находящемся в плазме, то нужно, конечно, указать возможные значения дебаевского радиуса r_D. Они получатся из формулы (14), если считать n меняющимся в диапазоне 10^{21}–10^{24} см$^{-3}$, а температуру — в интервале 10^2–10^6 К. Такая плазма называется частично ионизованной плотной водородной плазмой (см., например, [11]). Естественно, что всегда должно быть $r_0 \ll r_D$.

Последний параметр, необходимый нам для решения конкретных задач, это поляризуемость α_p атома . Известно, что поляризуемость атома водорода в нормальном состоянии (с квантовыми числами $n = 1$, $m = 0$) равна $9a_B^3/2$ [14].

Приведенных выше числовых характеристик достаточно для полного решения задачи о фазах рассеяния в пайсовском приближении на водородном атоме в плазменной среде.

Заметим, что при конкретных вычислениях в формуле (14) температура T должна быть умножена на постоянную Больцмана $1.3807 \cdot 10^{-16}$ эрг/град, все другие параметры также выражаются в (14) в единицах СГС.

Таблица 4

№	l	δ_l	Условия для резонансов и ПЭР-фаз
1	1	$\dfrac{\pi}{2}$	$2\pi\Phi_1^{-1} = \dfrac{e^2\alpha_p}{r_D^4}\, r_D^2(kr_D)$
2	2	$\dfrac{\pi}{2}$	$12\pi\Phi_2^{-1} = \dfrac{e^2\alpha_p}{r_D^4}\, r_D^2(kr_D)^3$
3	2	π	$6\pi\Phi_1^{-1} = \dfrac{e^2\alpha_p}{r_D^4}\, r_D^2(kr_D)$
4	3	$\dfrac{\pi}{2}$	$270\pi\Phi_3^{-1} = \dfrac{e^2\alpha_p}{r_D^4}\, r_D^2(kr_D)^5$
5	3	π	$15\pi\Phi_2^{-1} = \dfrac{e^2\alpha_p}{r_D^4}\, r_D^2(kr_D)^3$
6	3	$\dfrac{3\pi}{2}$	$12\pi\Phi_1^{-1} = \dfrac{e^2\alpha_p}{r_D^4}\, r_D^2(kr_D)$

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Pais, Proc. Cambr. Phil. Soc. **42**, 45 (1946).

2. Т. Титц, ЖЭТФ **37**, 294 (1959).

3. Ю. М. Брук, А. Н. Волощук, УФН **182**, 173 (2012).

4. Ю. М. Брук, ТМФ **66**, 392 (1986).

5. W. J. Romo and S. R. Valluri, J. Phys. B **23**, 4223 (1990).

6. W. J. Romo and S. R. Valluri, Phys. Scripta **71**, 572 (2005).

7. R. Redmer, Phys. Rep. **282**, 35 (1997).

8. T. S. Ramazanov, K. Zh. Galiyev, K. N. Dzhumagulova, G. Röpke, and R. Redmer, J. Phys. A **56**, 6173 (2003).

9. Г. Месси, *Отрицательные ионы*, Мир, Москва (1979), гл. 15 [Harrie Massey, *Negative Ions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1976)].

10. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960) [H. A. Bete and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms*, Springer-Verlag, Berlin (1957)].

11. Young-Dae Jung and D. Kato, Research Report NIFS-949 (2009) (National Institute for Fusion Science, Japan).

12. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды* (изд. 2-е), Физматлит, Москва (2003).

13. Ю. А. Брычков, *Специальные функции, производные, интегралы, ряды и другие формулы*, Физматлит, Москва (2006).

14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (изд. 6-е), Физматлит, Москва (2008), § 77, с. 359.