# 1 Основні положення квантової механіки

• У квантовій механіці стан системи описується в термінах хвильової функції $\psi$ — вектор-стовпчик у Гільбертовому просторі.
• У хвильовій функції міститься вся інформація про систему.
• Хвильова функція $\psi$ комплексна.
• Чи є хвильова функція експериментально спостережуваною величиною?
Ні. На експерименті вимірюються величини, які виражаються через білінійні комбінації $\psi$. Наприклад:
$dW = \psi^*\psi dV$ — ймовірність знайти частинку в заданому об'ємі $dV$;
$\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$ — густина струму;
$< \psi_2|Q|\psi_1 > \equiv \int \psi_2^*\hat{Q}\psi_1\, dV$ — матричний елемент.
• Чи завжди різні хвильові функції описують різні фізичні стани системи?
Виконаємо заміну $\psi \to e^{i\alpha}\psi$. Як при цьому зміняться білінійні комбінації? При $\alpha = \text{const} \in R$ білінійні комбінації $\psi$ не зміняться. Це означає, що фізичні стани систем, що описуються хвильовими функціями $\psi$ та $e^{i\alpha}\psi$, експериментально тотожні (не відрізняються на експерименті). Про множину хвильових функцій виду $\{e^{i\alpha}\psi\}$, що відмінні лише за фазовим множником, кажуть, що вона утворює промінь у гільбертовому просторі. Різним фізичним станам відповідають різні промені.
• Хвильова функція $\psi$ знаходиться з рівняння Шредінгера.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi,$$

$\hat{H}$ — гамільтоніан системи. В розгорнутому вигляді

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\Big)\psi = (H_0 + V)\psi,$$

$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ — гамільтоніан вільної частинки, $V$ — потенціал взаємодії.
• Кожній фізичній (вимірюваній) величині $Q$ у квантовій механіці відповідає оператор $\hat{Q}$.
• Що вимірює експериментатор?
При вимірюванні величини $Q$ експериментатор вимірює *власні значення* цього оператора, які знаходяться з рівняння:

$$\hat{Q}\psi_q = q\psi_q$$

$\hat{Q}$ — оператор, що відповідає величині $Q$;
$q$ — власне значення оператора $\hat{Q}$;
$\psi_q$ — власна функція оператора $\hat{Q}$, що відповідає власному значенню $q$.
• Набір власних значень оператора називається його спектром. Спектр оператора може бути як дискретним, так і неперервним (або змішаним).
• Яким вимогам має відповідати оператор фізичної величини?
Оскільки власні значення оператора є експериментально вимірюваними величинами, а отже дійсними, то оператор, що відповідає фізичній величині, має бути ермітовим (самоспряженим).

Ермітів оператор: $\langle\psi_1|\hat{Q}\psi_2\rangle = \langle\hat{Q}\psi_1|\psi_2\rangle \quad\Rightarrow\quad$ спектр дійсний.

• Набір власних функцій $\{\psi_q\}$ ермітового оператора утворює повний базис: довільний стан системи $\psi$ може бути розкладений по цьому базису

$$\psi = \sum_q c_q\psi_q\,, \quad c_q \text{ — комплексні коефіцієнти.}$$

У випадку ортонормованого базису (для якого $\langle\psi_q|\psi_{q'}\rangle = \delta_{qq'}$) коефіцієнти $c_q$ дорівнюють

$$c_q = \int \psi_q^* \psi \, dV \, .$$

- Ймовірність отримати при вимірюванні значення $q$ дорівнює квадрату модуля коефіцієнта $c_q$:

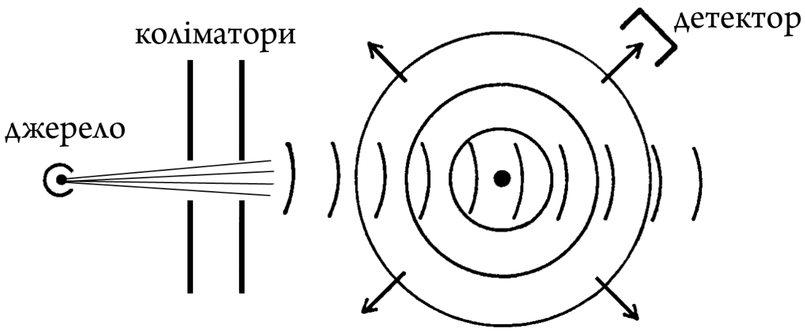
$$P(q) = |c_q|^2.$$

- Власні функції оператора імпульса $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$ — плоскі хвилі, спектр — неперервний

$$\hat{\vec{p}}\psi_p = \vec{p}\psi_p \quad \Rightarrow \quad \psi_p = e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}.$$

## 2 Задача розсіяння в КМ

Розглянемо розсіяння частинки на ядрі/атомі.
Функція коліматора — створити пучок частинок з однаковим $\vec{p}$ та відсіяти частинки, що не




розсіявшись потрапляють на детектор.

Джерело частинок є монохроматором, таким чином, у падаючому пучку містяться частинки з однаковими $E$ і $\vec{p}$.

Детектор фіксує кількість частинок, що розсіюються у заданому напрямку за одиницю часу. Можливі дві постановки задачі:

Пряма задача розсіяння — знаючи потенціал $V(\vec{r})$, знайти ймовірність розсіяння частинки у заданому напрямку.

Обернена задача розсіяння — знаючи ймовірність розсіяння частинок, знайти розсіюючий потенціал $V(\vec{r})$.

Ми будемо спочатку розв'язувати пряму задачу розсіяння.

Потік падаючих частинок представляється хвильовою функцією

$$\psi_{in} = e^{\frac{i\vec{p}_{in}\vec{r}}{\hbar}}.$$

Ця хвильова функція є власною функцією оператора імпульсу $\hat{\vec{p}}$

$$\hat{\vec{p}}\psi_{in} = \vec{p}_{in}\psi_{in}$$

Хвильова функція розсіяних частинок знаходиться з рівняння Шредінгера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\Big)\psi = (H_0 + V)\psi \tag{1}$$

Оскільки енергія падаючих частинок стала $E = const$, то у КМ цій енергії відповідає стаціонарна хвильова функція:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(\vec{r}), \tag{2}$$

де $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ — власна функція оператора енергії $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$. Підставивши (2) в (1), отримаємо стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$(\hat{H}_0 - E + V(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = 0.$$

Якщо ввести хвильовий вектор $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ (формула де-Бройля)

$$p = \hbar k, \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

то попереднє рівняння зводиться до

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r})\psi(\vec{r}). \tag{3}$$

Наша задача — знайти розв'язок цього рівняння. З довільним потенціалом ця задача точно не вирішується, тому її потрібно вміти розв'язувати наближено із довільною заданою точністю. Для цього застосовують метод функції Гріна та теорію збурень.

# 3 Функція Гріна

За допомогою функцій Гріна розв'язують неоднорідні диференційні рівняння при умові, що розв'язок однорідного рівняння відомий. Наприклад,

$$\hat{L}_x y(x) = f(x), \tag{4}$$

де $\hat{L}_x$ — диференційний оператор, $y(x)$ — шуканий розв'язок. Введемо функцію Гріна $G(x, x')$, яка задовольняє рівнянню

$$\hat{L}_x G(x, x') = \delta(x - x'). \tag{5}$$

Якщо функція Гріна відома, можна знайти частинний розв'язок рівняння (4) з довільною правою частиною $f(x)$:

$$y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x')f(x')dx' \,. \tag{6}$$

Дійсно, домножимо ліву і праву частини (5) на $f(x')$ та проінтегруємо по всім $x'$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Big(\hat{L}_x G(x, x') = \delta(x - x')\Big) f(x')dx'$$

Оскільки

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x')\delta(x - x')dx' = f(x),$$

то

$$\hat{L}_x \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x')f(x')dx' = f(x).$$

Порівняємо цей вираз з (4) отримуємо розв'язок (6). Загальний розв'язок (4) є сумою загального розв'язку однорідного рівняння та частинного розвязку неоднорідного

$$y(x) = y_0(x) + \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x')f(x')dx',$$

де $y_0(x)$ — загальний розв'язок однорідного рівняння.

# 4 Інтегральне рівняння Ліпмана–Швінгера

Функція Гріна рівняння (3) визначається аналогічно до (5):

$$(\Delta_r + k^2)G(r, r') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r'}). \tag{7}$$

Для знаходження $G(r, r')$ помітимо, що оператор $(\Delta_r + k^2)$, а також функція $\delta^3(\vec{r} - \vec{r'})$ — трансляційно-інваріантні, тобто не змінюються при заміні

$$\vec{r} \to \vec{r} + \vec{a}\,, \quad \vec{r'} \to \vec{r'} + \vec{a}\,, \quad \vec{a} = \text{const}.$$

Отже, можемо шукати розв'язок у вигляді $G(\vec{r} - \vec{r'})$, який також є трансляційно-інваріантним.

Представимо $G(\vec{r} - \vec{r'})$ у вигляді інтеграла Фур'є

$$G(\vec{r} - \vec{r'}) = \int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} G(\vec{q}) \frac{d^3q}{(2\pi)^3}. \tag{8}$$

Фур'є образ $G(\vec{q})$ пов'язаний з $G(\vec{r} - \vec{r'})$ співвідношенням

$$G(\vec{q}) = \int e^{-i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} G(\vec{r} - \vec{r'}) dV.$$

Фур'є образ $\delta$-функції — одиниця:

$$\int e^{-i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r'}) dV = 1,$$

звідки

$$\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r'}) = \int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}.$$

Підставляємо усе у (7)

$$(\Delta_r + k^2) \int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} G(\vec{q}) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = \int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}.$$

Оскільки $\Delta_r e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} = -q^2 e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})}$, то (7) зводиться до рівняння

$$\int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} \Big( (k^2 - q^2) G(\vec{q}) - 1 \Big) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = 0.$$

Вираз у дужках має дорівнювати нулю, оскільки доданки з експонентами є лінійно незалежними. Отже,

$$G(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}.$$

Підставивши $G(\vec{q})$ у (8) отримуємо функцію Гріна нашої задачі:

$$G(\vec{r} - \vec{r'}) = \int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r'})} \frac{1}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}. \tag{9}$$

Тут $\varepsilon > 0$ — нескінченно-мала величина, яка введена для того, щоб визначити спосіб обходу полюсів в підінтегральному виразі (9). Умова $\varepsilon > 0$ дає розв'язок у вигляді розбіжної сферичної хвилі (див. далі). Протилежна умова $\varepsilon < 0$ приводить до збіжної сферичної хвилі, що у випадку задачі розсіяння не відповідає фізичному змісту.

Щоб проінтегрувати в (9) перейдемо до сферичних координат, з віссю $z$ вздовж вектора $\vec{r} - \vec{r'}$.

$$G(\vec{r} - \vec{r'}) = \int e^{iq|\vec{r}-\vec{r'}|\cos\theta} \frac{1}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \frac{q^2 \sin\theta}{(2\pi)^3} dq d\theta d\varphi = \Big| \text{інтегруємо по } d\varphi \Big| =$$

$$= -\int e^{iq|\vec{r}-\vec{r'}|\cos\theta} \frac{1}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \frac{q^2}{(2\pi)^2} dq d\cos\theta = \Big| \text{інтегруємо по } d\theta \Big| =$$

$$= -\int \frac{q^2}{(2\pi)^2} \frac{dq}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \Big( \frac{e^{iq|\vec{r}-\vec{r'}|\cos\theta}}{iq|\vec{r}-\vec{r'}|} \Big|_0^\pi \Big) =$$

$$= \int_0^\infty \frac{q}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \frac{1}{i|\vec{r}-\vec{r'}|} \Big( e^{iq|\vec{r}-\vec{r'}|} - e^{-iq|\vec{r}-\vec{r'}|} \Big) \frac{dq}{(2\pi)^2} =$$

$$\Big| \text{в останньому доданку замінюємо } q \to -q \Big| =$$

$$= \frac{1}{i|\vec{r}-\vec{r'}|} \int_{-\infty}^\infty e^{iq|\vec{r}-\vec{r'}|} \frac{q}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \frac{dq}{(2\pi)^2}.$$

Для знаходження останнього інтегралу застосуємо теорію лишків та лему Жордана

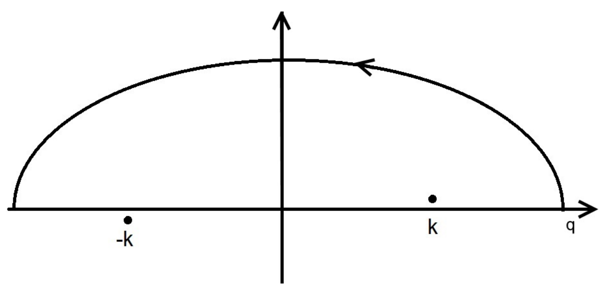



Рис. 1: Контур інтегрування

$$\int_{-\infty}^\infty e^{iq|\vec{r}-\vec{r'}|} \frac{q}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \frac{dq}{(2\pi)^2} = 2\pi i \operatorname{res} \left( \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{q e^{iq|\vec{r}-\vec{r'}|}}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \right)_{q=k} = -\frac{i}{4\pi} e^{ik|\vec{r}-\vec{r'}|}.$$

Остаточно

$$G(\vec{r} - \vec{r'}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r'}|}}{|\vec{r}-\vec{r'}|}.$$

Таким чином, знайшовши функцію Гріна, можемо записати формальний розв'язок рівняння (3) $(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r})$ (інтегральне рівняння Ліпмана-Швінгера у координатному представленні):

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int G(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') dV' \\ &= \psi_{in}(\vec{r}) + \psi_{scatt}(\vec{r}). \end{aligned} \tag{10}$$

Перший доданок враховує початкову умову: у відсутності розсіючого потенціалу $V(\vec{r})$ хвильова функція $\psi(\vec{r})$ зводиться лише до падаючої хвилі $e^{i\vec{k}_i\vec{r}}$.

Рівняння (10) можна розвязувати методом послідовних наближень (теорія збурень). В нульовому наближенні (при $V(\vec{r}) = 0$)

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

Перше наближення отримується підстановкою нульового наближення в праву частину рівняння (10) і називається першим борнівським наближенням

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \frac{2m}{\hbar^2}\int G(\vec{r}-\vec{r'})V(\vec{r'})e^{i\vec{k}_i\vec{r'}}dV'.$$

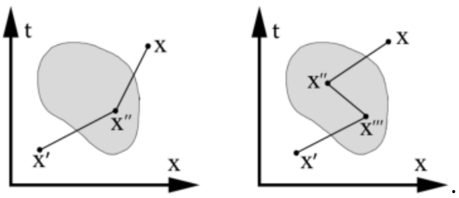
$n$-те наближення $\psi^{(n)}$ отримується з $(n-1)$-го підстановкою останнього в праву частину (10):

$$\psi^{(n)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \frac{2m}{\hbar^2}\int G(\vec{r}-\vec{r'})V(\vec{r'})\psi^{(n-1)}(\vec{r'})dV'.$$

Повторюючи цю процедуру, отримуємо ряд теорії збурень

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i\vec{r}} + \frac{2m}{\hbar^2}\int G(\vec{r}-\vec{r'})V(\vec{r'})e^{i\vec{k}_i\vec{r'}}dV' + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2\int G(\vec{r}-\vec{r'})V(\vec{r'})G(\vec{r'}-\vec{r''})V(\vec{r''})e^{i\vec{k}_i\vec{r''}}dV'dV'' + \dots$$

Кожний доданок в цьому ряді описує внесок в амплітуду $\psi$ процесів з однократним розсіянням (другий доданок, кінематичний підхід), двократним розсіянням і т.д.




# Розсіяна хвиля на великій відстані

Підставляючи в (10) явний вигляд функції Гріна

$$G(\vec{r}-\vec{r'}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r'}|}}{|\vec{r}-\vec{r'}|}.$$

можна отримати асимптотику розсіяної хвилі на великій (в порівнянні з розмірами атома) відстані $r$ від центру розсіяння.

Для короткодіючого потенціалу (який спадає швидше за $1/r$) інтегрування в (10) проводиться лише по $r' \ll r$ і тому можемо наближено написати

$$|\vec{r}-\vec{r'}| \approx r - r'\cos\vartheta, \quad \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r'}|} \approx \frac{1}{r}, \qquad r \gg r',$$

$\vartheta$ — кут між вектором $\vec{r'}$ та напрямком в точку спостереження $\vec{r}$. Підставляючи ці розклади в функцію Гріна, знаходимо

$$G(\vec{r}-\vec{r'}) \approx -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}e^{-i\vec{k}_f\vec{r'}},$$

де $\vec{k}_f = k\frac{\vec{r}}{r}$ — хвильовий вектор розсіянної хвилі.

Асимптотика розсіянної хвилі має вигляд сферичної хвилі

$$\psi_{scatt}(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\vec{k}_f\vec{r'}}V(\vec{r'})\psi(\vec{r'})dV' = \frac{e^{ikr}}{r}f(\theta),$$

де

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{k}_f\vec{r'}}V(\vec{r'})\psi(\vec{r'})dV'$$

— атомний/ядерний фактор, який є функцією від кута розсіяння $\theta$ — кут між $\vec{k}_i$ та $\vec{k}_f$. Зокрема, в першому борнівському наближенні (однократне розсіяння)

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}}V(\vec{r})dV\,, \quad \vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i.$$