

**stichting
mathematisch
centrum**



AFDELING TOEGEPASTE WISKUNDE

TN 56/70

MEI

D.S. FOKKEMA
MATHEMATISCHE ASPECTEN VAN DE SCHRÖDINGERVERGELIJKING
IN DE VERSTROOIINGSTHEORIE

TW

2e boerhaavestraat 49 amsterdam

Printed at the Mathematical Centre, 49, 2e Boerhaavestraat, Amsterdam.

The Mathematical Centre, founded the 11-th of February 1946, is a non-profit institution aiming at the promotion of pure mathematics and its applications. It is sponsored by the Netherlands Government through the Netherlands Organization for the Advancement of Pure Research (Z.W.O), by the Municipality of Amsterdam, by the University of Amsterdam, by the Free University at Amsterdam, and by industries.

INHOUD

1. De Schrödingervergelijking.
 2. Separatie van de Schrödingervergelijking.
 3. Eisen aan de potentiaal.
 4. Conditie in de oorsprong.
 5. Voorbeelden van berekenbare functies $\phi(\lambda, k, r)$.
 6. Conditie in oneindig.
 7. Voorbeelden van $f(\lambda, k, r)$ voor de nulpotentiaal en de Coulomb-potentiaal.
 8. De Jostfunctie.
 9. De S matrix.
 10. De fase verschuiving.
 11. Gebonden toestanden.
 12. Resonanties.
 13. De verstrooiingsamplitude uitgedrukt in $S(\lambda, k)$.
 14. De Watson-Sommerfeld transformatie.
 15. Asymptotisch gedrag van $\phi(\lambda, k, r)$.
 16. Reeksontwikkeling voor $\phi(\lambda, k, r)$.
 17. Over de berekening van Reggepolen.
- Literatuurlijst.

1. De Schrödingervergelijking

Een quantum mechanisch verstrooiingsproces kan men beschrijven met behulp van een golf functie χ . Dit gebeurt zo dat de waarschijnlijkheid om een deeltje in een volume-element aan te treffen gegeven wordt door $||\chi||^2$. Deze golf functie χ voldoet aan de zogenaamde driedimensionale Schrödingervergelijking

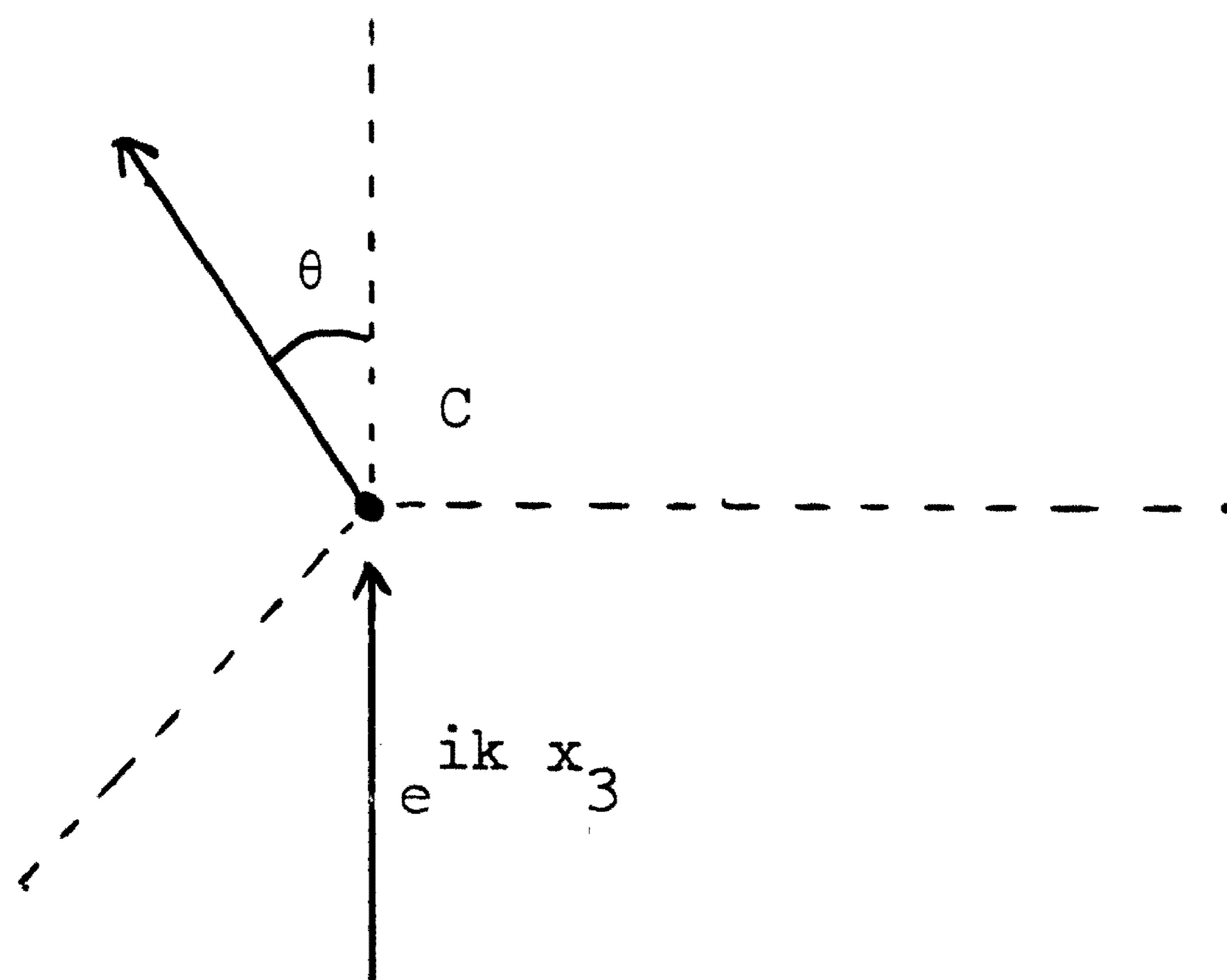
$$\Delta \chi(\vec{x}) + [k^2 - V(\vec{x})] \chi(\vec{x}) = 0. \quad (1.1)$$

De componenten van $\vec{x}$ worden gegeven door x_1 , x_2 en x_3 . Bij een verstrooiingsproces heeft men te maken met een invallende bundel deeltjes, die een interactie hebben met een object, hier C genoemd. De interactie van de invallende golf met het object wordt beschreven door de in de Schrödingervergelijking voorkomende grootte $V(\vec{x})$. In dit fysische proces zal er normaliter geen voorkeursrichting zijn. Het maakt geen verschil van welke richting de bundel invalt. Opgrond hiervan kunnen we in verdere beschouwingen $V(\vec{x})$ bolsymmetrisch kiezen.

$$V(\vec{x}) = V(r), \quad r = |\vec{x}|.$$

De potentiaalsterkte is alleen afhankelijk van de afstand tot de oorsprong, waar het verstrooiende object gedacht wordt.

Nu kiezen we om een beeld te krijgen de invallende bundel evenwijdig aan de x_3 richting, komend vanuit $x_3 = -\infty$. (Zie afbeelding.)



De invallende bundel wordt voorgesteld als een vlakke golf in de positieve x_3 richting. Het is duidelijk dat gezien de bolsymmetrie van de potentiaal wisselwerking de uittredende golf een rotatie symmetrie om de x_3 richting zal hebben.

De uittredende golf is een bolgolf waarvan de amplitude behalve van k alleen afhankelijk is van $\cos \theta$. θ is dan de hoek met de positieve x_3 as. De uittredende golf ziet er dan uit als $\frac{e^{ikr}}{r} A(k, \cos \theta)$.

Mathematisch is een verstrooiingsproces dan ook te definiëren als een oplossing van (1.1) met asymptotisch gedrag voor $r \rightarrow \infty$.

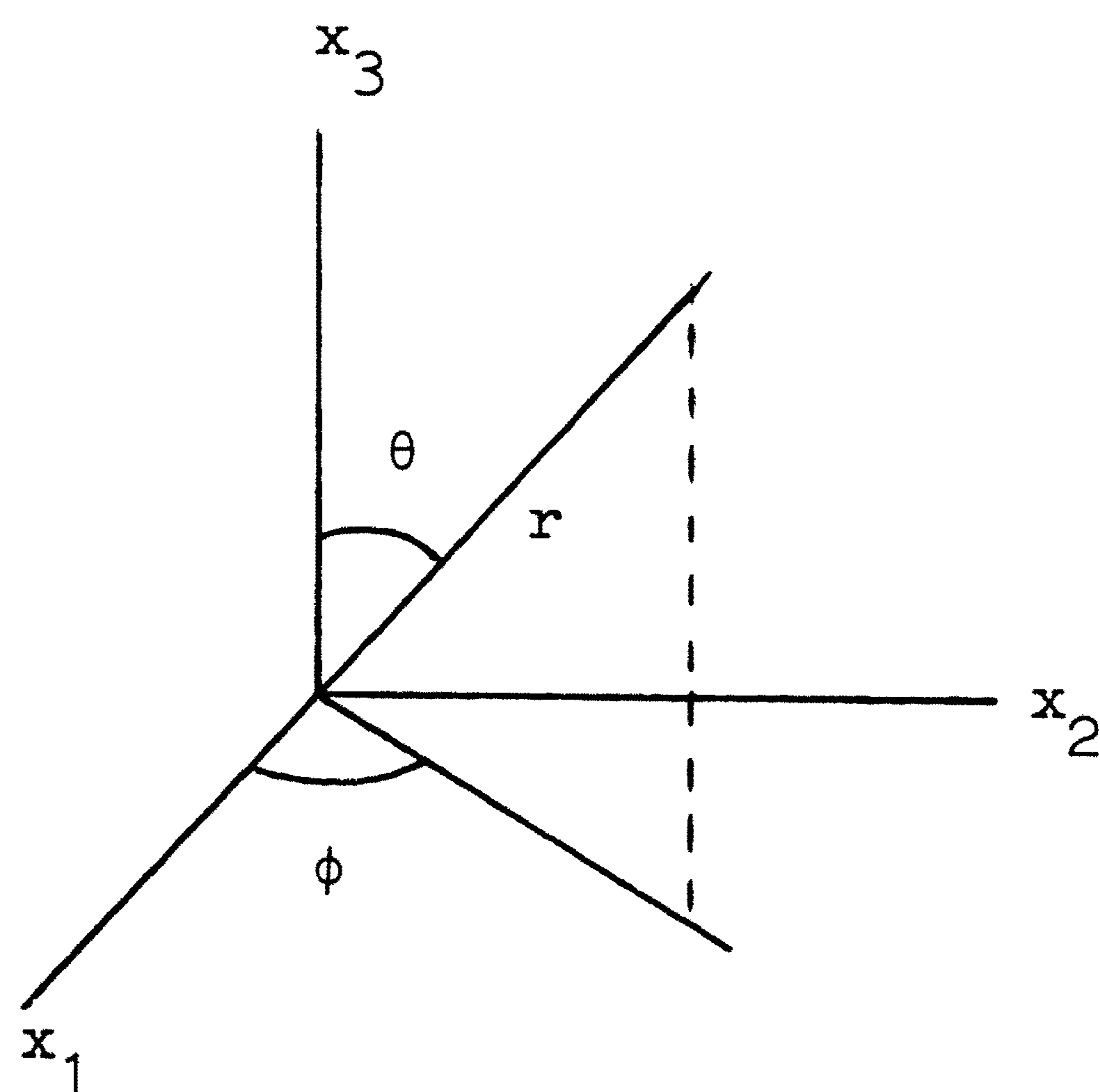
$$\chi(\vec{x}) \sim e^{ik x_3} + \frac{e^{ikr}}{r} A(k, \cos \theta) \quad (1.2)$$

$A(k, \cos \theta)$ wordt de verstrooiingsamplitude genoemd.

Er zijn veel oplossingen van (1.1); alleen die oplossingen met bovenstaand asymptotisch gedrag stellen een verstrooiingsproces voor. (1.2) is op te vatten als de randvoorwaarde voor het verstrooiingsproces.

2. Separatie van de Schrödingervergelijking

De bolsymmetrie van het verstrooiingsprobleem suggereert al direkt het gebruik van bolcoördinaten.



$$x_1 = r \sin \theta \cos \phi$$

$$x_2 = r \sin \theta \sin \phi$$

$$x_3 = r \cos \theta.$$

In deze coördinaten is de Laplace operator Δ te schrijven als

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} = \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ &+ \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \end{aligned}$$

Daar, zoals uit het voorgaande gebleken is, de oplossing niet van ϕ afhankelijk is, is de Schrödingervergelijking nu te schrijven als

$$\begin{aligned} &\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \chi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \chi}{\partial \theta} \right) \\ &+ (k^2 - V) \chi = 0. \end{aligned}$$

Nemen we $\chi(\vec{x}) = \frac{\psi(r)}{r} Y(\cos \theta)$ dan levert dit de vergelijkingen

$$\frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} - \frac{\lambda^2 - 1}{r^2} \psi(r) + [k^2 - V(r)] \psi(r) = 0 \quad (2.1)$$

en

$$\frac{d}{d \cos \theta} \left[(1 - \cos^2 \theta) \frac{dY(\cos \theta)}{d \cos \theta} \right] + (\lambda^2 - 1) Y(\cos \theta) = 0. \quad (2.2)$$

De eerste vergelijking (2.1), is de zogenaamde radiële Schrödingervergelijking. Hij zal de basis vormen voor verder onderzoek naar de oplossingen van (1.1).

De tweede vergelijking is de Legendre differentiaalvergelijking, met oplossingen $Y(\cos \theta) = P_{\lambda - \frac{1}{2}}(\cos \theta)$, de Legendre polynomen.

Algemeen schrijven we dus

$$\chi(\vec{x}) = \frac{\psi(r)}{r} P_{\lambda-\frac{1}{2}}(\cos \theta). \quad (2.3)$$

3. Eisen aan de potentiaal

Bij een algemenere behandeling van het verstrooiingsprobleem zullen we moeten veronderstellen dat de potentiaal aan enkele eisen voldoet. Deze zijn

$$\begin{aligned} \text{a.} \quad & V(r) = O\left(\frac{1}{r^{2-\epsilon}}\right) \text{ voor } r \rightarrow 0. \\ \text{b.} \quad & \int_1^\infty |V(r)| \, dr < \infty. \end{aligned} \quad (3.1)$$

4. Conditie in de oorsprong

Uit de vele oplossingen van (2.1) proberen we hier een bijzondere te selecteren door een randvoorwaarde in de oorsprong op te leggen. De oplossing die dit oplevert representeert geen verstrooiingsproces en dient dus niet gezien te worden als een inkomende of uitgaande golf. Het is gewoon een mathematische oplossing van de radiële Schrödingervergelijking. Hij zal er echter toe bijdragen een aantal eigenschappen af te leiden over oplossingen die wel een verstrooiingsproces voorstellen. En die dus aan een andere randvoorwaarden voldoen, te weten voorwaarde (1.2).

Schrijven we nogmaals de radiële Schrödingervergelijking.

$$\psi''(r) + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r) \right] \psi(r) = 0.$$

Nabij de oorsprong gedraagt $V(r)$ zich als

$$V(r) = O\left(\frac{1}{r^{2-\epsilon}}\right)$$

zodat voor r klein de term $\frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2}$ zal overheersen.

De Schrödingervergelijking zal in dit gebied dan ook het karakter hebben als

$$\psi''(r) - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} \psi(r) = 0.$$

Dit suggereert het bestaan van een oplossing $\psi(r)$ met asymptotisch gedrag voor $r \rightarrow 0$

$$\psi(r) \sim r^{\frac{1}{2} \pm \lambda}.$$

We zullen proberen zo'n oplossing te vinden en noemen hem als hij bestaat $\phi(\lambda, k, r)$. $\phi(\lambda, k, r)$ voldoet aan de vergelijking

$$\frac{\partial^2 \phi(\lambda, k, r)}{\partial r^2} + \frac{\frac{1}{4} - \lambda^2}{r^2} \phi(\lambda, k, r) = [V(r) - k^2] \phi(\lambda, k, r).$$

Stellen we

$$\phi(\lambda, k, r) = \alpha(r) r^{\lambda + \frac{1}{2}} + \beta(r) r^{-\lambda + \frac{1}{2}}$$

dan levert variatie van constanten de integraal vergelijking voor $\phi(\lambda, k, r)$

$$\phi(\lambda, k, r) = r^{\lambda + \frac{1}{2}} + \frac{1}{2\lambda} \int_0^r \left[\left(\frac{\rho}{r} \right)^\lambda - \left(\frac{r}{\rho} \right)^\lambda \right] \sqrt{r\rho} [k^2 - V(\rho)] \phi(\lambda, k, \rho) d\rho.$$

Stel $\phi(\lambda, k, r) = r^{\lambda + \frac{1}{2}} f(\lambda, k, r)$ dan geeft dit voor f

$$f(\lambda, k, r) = 1 - \frac{1}{2\lambda} \int_0^r \left(1 - \frac{\rho^2}{r^{2\lambda}} \right) (k^2 - V(\rho)) \rho f(\lambda, k, \rho) d\rho.$$

Er is een M te kiezen zodat

$$|(k^2 - V)\rho| \leq M \rho^{-1+\epsilon}.$$

$$2\lambda = s.$$

Voor f kiezen we de reeksontwikkeling

$$f = f_0 + \sum_{n=1}^{\infty} f_n - f_{n-1}$$

$$f_0 = 1.$$

Dit geeft

$$\begin{aligned} |f_1 - f_0| &\leq M \frac{1}{|s|} \int_0^r \left| 1 - \left(\frac{\rho}{r}\right)^s \right| \rho^{-1+\varepsilon} d\rho \\ &= M r^\varepsilon \frac{1}{|s|} \int_0^1 |1 - \tau^s| \tau^{-1+\varepsilon} d\tau \\ &= M r^\varepsilon \theta(s, \varepsilon) \end{aligned}$$

met

$$\theta(s, \varepsilon) = \frac{1}{|s|} \int_0^1 |1 - \tau^s| \tau^{-1+\varepsilon} d\tau$$

$$|f_2 - f_1| \leq M^2 r^{2\varepsilon} \theta(s, \varepsilon) \theta(s, 2\varepsilon)$$

$$|f_n - f_{n-1}| \leq (Mr^\varepsilon)^n \theta(s, \varepsilon) \dots \theta(s, n\varepsilon).$$

$\theta(s, \varepsilon)$ is als volgt te schatten

$$|1 - \tau^s| \leq 1 + |\tau^s| = 1 + \tau^\alpha$$

als $s = \alpha + i\beta$

$$\theta(s, \varepsilon) \leq \frac{1}{|s|} \int_0^1 (1 + \tau^\alpha) \tau^{-1+\varepsilon} d\tau$$

$$= \frac{1}{\varepsilon |s|} + \frac{1}{(\alpha + \varepsilon) |s|} \leq \frac{c(s)}{\varepsilon |s|}.$$

Hieruit volgt

$$|f_n - f_{n-1}| \leq (Mr^2)^n \left(\frac{c(s)}{\varepsilon|s|}\right)^n \frac{1}{n!}.$$

Dit geeft uniforme convergentie voor de reeksontwikkeling van $f(\lambda, k, r)$ in het gebied $\operatorname{Re} s > -\varepsilon_0 > -\varepsilon$ en $|s| > \delta_0$. ε_0 vast, willekeurig dicht bij ε te kiezen. δ_0 willekeurig met $0 < \delta_0 < \varepsilon_0$. Voor de omgeving van $s = 0$ dient men een andere schatting te gebruiken.

$$\lim_{s \rightarrow 0} \left| \frac{1-\tau^s}{s} \right| = -\log \tau, \quad 0 \leq \tau \leq 1.$$

Kies nu een $\delta_1 > 0$ zo dat voor $|s| < \delta_1$

$$\left| \frac{1-\tau^s}{s} \right| \leq -\log \tau + 1.$$

Dit geeft voor $\theta(s, \varepsilon)$

$$\begin{aligned} \theta(s, \varepsilon) &\leq \int_0^1 (-\log \tau + 1) \tau^{-1+\varepsilon} d\tau \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{\varepsilon} \end{aligned}$$

$$\theta(s, \varepsilon) \dots \theta(s, n\varepsilon) \leq c(\varepsilon) \frac{1}{\varepsilon^n n!}.$$

Als we nu $\delta_0 < \delta_1$ kiezen is uniforme convergentie van de reeksontwikkeling bewezen voor $\operatorname{Re} s > -\varepsilon_0 > -\varepsilon$.

Alle termen van bovengenoemde reeks zijn analytisch in λ en k^2 , de reeks is uniformconvergent in deze variabelen. Hieruit volgt dat $\phi(\lambda, k, r)$ bestaat voor $\operatorname{Re} \lambda > -\frac{1}{2}\varepsilon$ en in dit gebied analytisch is in λ en k^2 .

Hiermee is ook nog een andere oplossing van (2.1) gevonden, namelijk $\phi(-\lambda, k, r)$ deze is lineair onafhankelijk van $\phi(\lambda, k, r)$ en gedraagt zich in de oorsprong als

$$\phi(-\lambda, k, r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{-\lambda + \frac{1}{2}}.$$

Mandelstam (1962) laat zien dat voor potentialen van het type

$$V(r) = \int_m^\infty c(\mu) e^{-\mu r} d\mu,$$

de potentialen van Yukawa, het analyticiteitsgebied tot het gehele complexe λ vlak uit te breiden is.

5. Voorbeelden van berekenbare functies $\phi(\lambda, k, r)$

We beschouwen eerst de nulpotential, $V(r) \equiv 0$.

Nu reduceert de radiële Schrödingervergelijking voor $\phi(\lambda, k, r)$ zich tot

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + (k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2}) \phi = 0. \quad (5.1)$$

Nemen we $\phi = r^{\frac{1}{2}} f_\lambda$ dan verschijnt de differentiaalvergelijking voor f_λ

$$\frac{\partial^2 f_\lambda}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f_\lambda}{\partial r} + (k^2 - \frac{\lambda^2}{r^2}) f_\lambda = 0.$$

Deze vergelijking heeft als in de oorsprong reguliere oplossing

$$f_\lambda = J_\lambda(kr).$$

Kiezen we nu

$$\phi(\lambda, k, r) = 2^\lambda k^{-\lambda} \Gamma(\lambda+1) r^{\frac{1}{2}} J_\lambda(kr)$$

dan geldt inderdaad

$$\phi(\lambda, k, r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\lambda + \frac{1}{2}}.$$

Voor de Coulombpotential $V(r) = \frac{a}{r}$ hebben we de vergelijking voor ϕ

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} \phi + (k^2 - \frac{a}{r}) \phi = 0. \quad (5.2)$$

De oplossing die in de oorsprong regulier is, is

$$\begin{aligned}\phi &= k^{-\lambda-\frac{1}{2}} F_{\lambda-\frac{1}{2}}\left(\frac{a}{2k}; kr\right) \\ &= c_{\lambda} e^{ikr} r^{\lambda+\frac{1}{2}} F(\lambda+\frac{1}{2}+ikr | 2\lambda+1 | -2ikr)\end{aligned}$$

en
$$\phi \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\lambda+\frac{1}{2}}.$$

6. Conditie in oneindig

In hoofdstuk vier is een algemene oplossing van de radiële Schrödinger-vergelijking gevonden die voldoet aan een randvoorwaarde in de oorsprong.

Nu zullen we een geschikte conditie in oneindig opleggen en wederom een algemene oplossing zoeken.

De differentiaalvergelijking is weer als volgt

$$\psi''(r) + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r) \right] \psi(r) = 0.$$

Voor $r \rightarrow \infty$ zal k^2 de andere termen binnen de haken verre overheersen. Dit wekt het vermoeden dat er een oplossing zal bestaan met asymptotisch gedrag

$$\psi(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{\pm ikr}.$$

Zo'n oplossing noemen we indien hij bestaat $f(\lambda, k, r)$ en we eisen

$$\lim_{r \rightarrow \infty} e^{ikr} f(\lambda, k, r) = 1.$$

Stellen we

$$f(\lambda, k, r) = \alpha(r) e^{-ikr} + \beta(r) e^{ikr}$$

dan levert dit de integraalvergelijking

$$f(\lambda, k, r) = e^{-ikr} - \frac{1}{k} \int_r^\infty \sin k(r-\rho) \left[V(\rho) + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} \right] f(\lambda, k, \rho) d\rho.$$

Stellen we

$$f = f_0 + \sum_1^\infty f_n - f_{n-1}$$

en

$$f_0 = e^{-ikr}$$

dan geldt

$$|f_1 - f_0| \leq e^{br} c \theta(r)$$

als $k = h + ib$

$$|f_n - f_{n-1}| \leq e^{br} \frac{\{c \theta(r)\}^n}{n!}$$

met

$$\theta(r) = \int_r^\infty \left| V(\rho) + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} \right| \frac{\rho}{1+|k|\rho} e^{(|b|+b)\rho} d\rho. \quad (6.1)$$

Dit levert weer dat $f(\lambda, k, r)$ bestaat voor $\text{Im } k < 0$ en in dit gebied analytisch is in λ en k .

Voor potentialen van het Yukawa type is ook nu weer het analyticiteitsgebied uit te breiden.

Dit gaat met een door Doetsch (1950 pag. 362) ontworpen methode, door Bottini (1962) op deze materie toegepast. Voor bovengenoemde klasse van potentialen wordt dan bewezen dat $f(\lambda, k, r)$ analytisch is in het gehele complexe k vlak, behalve in het vertakkingspunt $k = 0$ met een coupure naar $+i\infty$. Zie eventueel ook Alfaro pag. 50.

7. Voorbeelden van $f(\lambda, k, r)$ voor de nulpotentiaal en de Coulomb-potentiaal

Dit levert weer dezelfde differentiaalvergelijkingen als in hoofdstuk vijf, nu alleen met andere randvoorwaarden.

Voor de nulpotentiaal

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + (k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2}) f = 0$$

met als oplossing

$$f(\lambda, k, r) = (\frac{1}{2} \pi kr)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}i\pi(\lambda + \frac{1}{2})} H_{\lambda}^{(2)}(kr).$$

Voor $r \rightarrow \infty$ heeft $H_{\lambda}^{(2)}(kr)$ het asymptotisch gedrag

$$H_{\lambda}^{(2)}(kr) \sim (\frac{2}{\pi kr})^{\frac{1}{2}} e^{i(-kr + \frac{1}{2}(\lambda + \frac{1}{2})\pi)}$$

zodat men voor $f(\lambda, k, r)$ inderdaad vindt

$$f(\lambda, k, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-ikr}.$$

Voor de Coulombpotentiaal hebben we de differentiaalvergelijking

$$f'' + (k^2 + \frac{\frac{1}{4} - \lambda^2}{r^2} - \frac{a}{r}) f = 0.$$

Voor $a = 0$ reduceert hij zich tot de vorige differentiaalvergelijking.

In dit geval blijkt er voor $a \neq 0$ geen oplossing f te bestaan met $f \sim e^{-ikr}$.

Dit komt omdat nu de integraalvorm voor $\theta(r)$ gegeven door (6.1) niet meer eindig is.

De oplossing die het asymptotisch gedrag e^{-ikr} het meest benadert is gegeven door

$$u_{\lambda - \frac{1}{2}}^{-}(\frac{a}{2k}, kr) = -2ie^{r\sigma_{\lambda}} c_{\lambda} e^{-ikr} kr^{\lambda + \frac{1}{2}}$$

$$w_1(\lambda + \frac{1}{2} - i\frac{a}{2k} |2\lambda + 1| 2ikr)$$

met asymptotisch gedrag

$$u_{\lambda-\frac{1}{2}}^- \sim \exp \left[-i \left(kr - \frac{a}{2k} \log 2kr - \frac{1}{2} (\lambda - \frac{1}{2}) \pi \right) \right]$$

zie bijvoorbeeld Messiah pag. 486.

8. De Jostfunctie

Eenvoudig in te zien is dat de Wanskiaan van twee oplossingen van

$$\psi''(r) + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + V(r) \right] \psi(r) = 0$$

onafhankelijk van r is. Op grond hiervan is de Jostfunctie als volgt te definiëren

$$\begin{aligned} F(\lambda, k) &= W[f(\lambda, k, r), \phi(\lambda, k, r)] \\ &= f(\lambda, k, r) \frac{\partial \phi(\lambda, k, r)}{\partial r} - \phi(\lambda, k, r) \frac{\partial f(\lambda, k, r)}{\partial r}. \end{aligned}$$

Uit de analyticiteitseigenschappen van $f(\lambda, k, r)$ en $\phi(\lambda, k, r)$ volgt dat $F(\lambda, k)$ analytisch is in λ voor $\text{Re } \lambda > -\frac{1}{2}\epsilon$ en vast k . ϵ is gedefinieerd in (3.1). Ook dat $F(\lambda, k)$ analytisch is in k voor $\text{Im } k < 0$ en vaste λ . Op deze eigenschappen is het theorema van Hartog toe te passen (Bockner en Martin 1948, pag. 140). Dit geeft dan dat $F(\lambda, k)$ analytisch is in het direkte produkt van $\text{Re } \lambda > -\frac{1}{2}\epsilon$ en $\text{Im } k < 0$. Met nog altijd een vertakkingspunt in $k = 0$. Voor Yukawische potentialen is dit gebied weer uit te breiden tot gehele k vlak.

9. De S matrix

De S matrix wordt gedefinieerd als

$$S(\lambda, k) = \frac{F(\lambda, k)}{F(\lambda, -k)} e^{i\pi(\lambda - \frac{1}{2})}.$$

$S(\lambda, k)$ is meromorf in λ en k voor $\text{Re } \lambda > -\frac{1}{2}\epsilon$, $\text{Im } k < 0$. Voor Yukawa potentialen vervalt de tweede conditie. Wel is er altijd een vertakingspunt in $k = 0$. $S(\lambda, k)$ heeft polen in de nulpunten van $F(\lambda, -k)$. Deze polen worden Reggepolen genoemd.

Unitariteitseigenschap

$$[S(\lambda, k)]^* = [S(\lambda^*, k^*)]^{-1}.$$

Dit volgt uit

$$\begin{aligned} [\phi(\lambda, k, r)]^* &= \phi(\lambda^*, k^*, r) \\ [f(\lambda, k, r)]^* &= f(\lambda^*, -k^*, r) \\ [F(\lambda, k)]^* &= F(\lambda^*, k^* e^{-i\pi}). \end{aligned}$$

Alleen als $V(r)$ reëel is voor r reëel en $r > 0$.

Voorbeelden

Voor de nulpotential $V(r) \equiv 0$ hebben we gevonden

$$\begin{aligned} \phi(\lambda, k, r) &= 2^\lambda k^{-\lambda} \Gamma(\lambda+1) r^{\frac{1}{2}} J_\lambda(kr) \\ f(\lambda, k, r) &= \left(\frac{1}{2} \pi kr\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}i\pi(\lambda+\frac{1}{2})} H_\lambda^{(2)}(kr). \end{aligned}$$

Dit geeft

$$\begin{aligned} F(\lambda, k) &= W(f, \phi) = \\ &= \left(\frac{1}{2} \pi k\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}i\pi(\lambda+\frac{1}{2})} 2^\lambda k^{-\lambda} \Gamma(\lambda+1) W_r[r^{\frac{1}{2}} J_\lambda(kr), r^{\frac{1}{2}} H_\lambda^{(2)}(kr)] \\ &= \sqrt{\frac{2}{\lambda}} k^{-\lambda+\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}i\pi(\lambda-\frac{1}{2})} \Gamma(\lambda+1) 2^\lambda \end{aligned}$$

en

$$S(\lambda, k) = \frac{F(\lambda, k)}{F(\lambda, -k)} e^{i\pi(\lambda-\frac{1}{2})} = 1.$$

De faktor $e^{i\pi(\lambda-\frac{1}{2})}$ in de definitie van $S(\lambda, k)$ is dan ook zo gekozen dat voor de nulpotential $S(\lambda, k) = 1$.

10. De fase verschuiving

De fase verschuiving $\delta(\lambda, k)$ wordt als volgt gedefinieerd

$$e^{2i\delta(\lambda, k)} = S(\lambda, k) = \frac{F(\lambda, k)}{F(\lambda, -k)} e^{i\pi(\lambda - \frac{1}{2})}. \quad (10.1)$$

De naam fase verschuiving is als volgt te begrijpen.

In het gebied waar $f(\lambda, k, r)$ en $f(\lambda, -k, r)$ beide bestaan (voor Yukawa-potentialen), vormen ze twee onafhankelijke oplossingen van (2.1).

$\phi(\lambda, k, r)$ is dus te schrijven als

$$\phi(\lambda, k, r) = c_1(\lambda, k) f(\lambda, -k, r) + c_2(\lambda, k) f(\lambda, k, r).$$

Direkt in te zien is ($r \rightarrow \infty$) dat $W\{f(\lambda, k, r), f(\lambda, -k, r)\} = 2ik$.

Neemt men de Wronskiaan van $\phi(\lambda, k, r)$ met $f(\lambda, k, r)$ dan krijgt men $F(\lambda, k)$.

Hieruit volgt dan

$$c_1(\lambda, k) = \frac{F(\lambda, k)}{2ik}, \quad c_2(\lambda, k) = -\frac{F(\lambda, -k)}{2ik}.$$

Dit geeft weer het asymptotisch gedrag van ϕ .

$$\phi \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2ik} [F(\lambda, k) e^{ikr} - F(\lambda, -k) e^{-ikr}]. \quad (10.2)$$

Uit (10.1) blijkt dat $F(\lambda, k)$ en $F(\lambda, -k)$ te schrijven zijn als

$$F(\lambda, k) = \tau(\lambda, k) e^{i\delta(\lambda, k) - \frac{1}{2}i\pi(\lambda - \frac{1}{2})}$$

$$F(\lambda, -k) = \tau(\lambda, k) e^{-i\delta(\lambda, k) + \frac{1}{2}i\pi(\lambda - \frac{1}{2})}.$$

Substitutie in (10.2) geeft

$$\phi(\lambda, k, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{k} \tau(\lambda, k) \sin[kr + \delta(\lambda, k) - \frac{1}{2}\pi(\lambda - \frac{1}{2})].$$

11. Gebonden toestanden

Definitie. Een gebonden toestand is een kwadratisch integreerbare oplossing van (1.1),

$$\Delta \chi(\vec{x}) + [k^2 - V(\vec{x})] \chi(\vec{x}) = 0$$

met halftallige λ waarde

$$\int d\Omega \int_0^\infty r^2 |\chi(\vec{x})|^2 dr = \int_0^\infty |\phi(\lambda, k, r)|^2 dr.$$

De kwadratische integreerbaarheid eist dat

$$\psi(r) = \chi(\vec{x}) r [P_1(\cos \theta)]^{-1}$$

regulier in de oorsprong is.

Hieruit volgt

$$\psi(r) = \phi(\lambda, k, r).$$

Behalve in het geval $\lambda = \frac{1}{2}$, dan is ook $\phi(-\frac{1}{2}, k, r)$ regulier in de oorsprong.

Reeds afgeleid is het asymptotisch gedrag voor ϕ

$$\phi(\lambda, k, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2ik} [F(\lambda, k) e^{ikr} - F(\lambda, -k) e^{-ikr}].$$

Het is duidelijk dat voor $\text{Im } k = 0$ er geen gebonden toestand mogelijk is. $\int_c^\infty |\phi|^2 dr$ zal dan altijd divergeren. Dus een gebonden toestand impliceert $\text{Im } k \neq 0$.

We nemen nu aan dat $\phi(\lambda, k_0, r)$ met een gebonden toestand correspondeert en dat $\text{Im } k_0 \neq 0$.

Nu geldt

$$\phi''(\lambda, k_0, r) + \{k_0^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\} \phi(\lambda, k_0, r) = 0$$

en ook

$$\phi^{*''}(\lambda, k_0, r) + \{k_0^{*2} - \frac{\lambda^2 - 1}{r^2} - V(r)\} \phi^*(\lambda, k_0, r) = 0.$$

Vermenigvuldigen we de bovenste met ϕ^* en de onderste vergelijking met ϕ , dan levert aftrekking

$$\frac{d}{dr} [\phi^* \phi' - \phi^{*'} \phi] = 2i \operatorname{Im} k_0^2 \cdot \phi \phi^*.$$

Met gebruikmaking van de kwadratische integreerbaarheid van ϕ op $[0, \infty)$,

$$\operatorname{Im} k_0^2 \int_0^\infty |\phi(\lambda, k_0, r)|^2 dr = 0$$

$$\phi \neq 0$$

dus $\operatorname{Im} k_0^2 = 2 \operatorname{Im} k_0 \operatorname{Re} k_0 = 0$ dus $\operatorname{Re} k_0 = 0$.

Hieruit blijkt, samenvattend:

Gebonden toestand $\Rightarrow \operatorname{Im} k \neq 0, \operatorname{Re} k = 0$.

Stel $k = ib$.

a. $b > 0$.

Uit het asymptotisch gedrag van $\phi(\lambda, k, r)$ volgt dat $F(\lambda, -k) = 0$, wil ϕ kwadratisch integreerbaar zijn.

Dan
$$\phi \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{F(\lambda, k)}{2ik} e^{-br}.$$

b. Stel $b < 0$

Dit geeft $F(\lambda, k) = 0$

$$\phi \sim \frac{F(\lambda, -k)}{-2ik} e^{br}.$$

Bij iedere gebonden toestand met $\operatorname{Im} k > 0$ hoort dus een Reggepool met $\operatorname{Re} k = 0$.

Omgekeerd levert iedere Reggepool met $\operatorname{Im} k > 0$ een gebonden toestand (mits λ halftallig), waaruit dan weer volgt dat $\operatorname{Re} k = 0$.

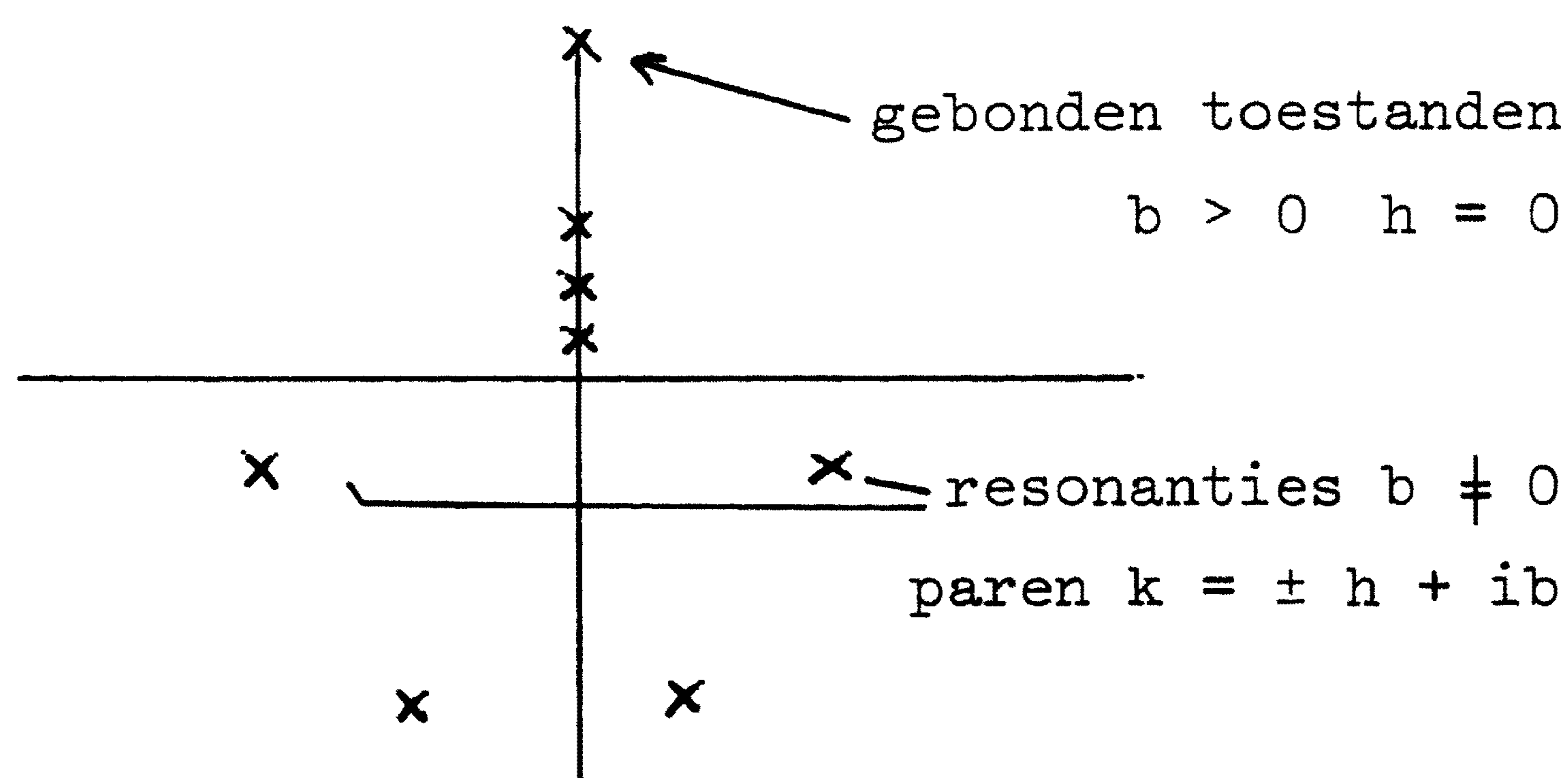
12. Resonanties

Dit zijn Reggepolen met $\text{Im } k < 0$ en λ reëel. Hier geldt niet meer dat ϕ kwadratisch integreerbaar is. Stellen we $k = h + ib$ dan blijkt dat bij λ reëel, in een Reggepool altijd moet gelden $b \neq 0$, op grond van

$$[F(\lambda, k)]^* = F(\lambda^*, -k^*).$$

Dus als $F(\lambda, k)$ een nulpunt heeft in $k = h + ib$ dan is er ook een nulpunt in $k = h - ib$.

Indien $b = 0$ zou dit geven $F(\lambda, k) = 0 = F(\lambda, -k)$ en dit is onmogelijk, $\phi(\lambda, k, r)$ zou identiek nul worden, en niet meer het voorgeschreven gedrag in de oorsprong hebben. Dit alles geeft het volgende beeld van de ligging van de Reggepolen in het complexe k vlak. λ halftallig.



13. De verstrooiingsamplitude uitgedrukt in $S(\lambda, k)$

Een verstrooiingsproces is een oplossing van de driedimensionale Schrödingervergelijking met asymptotisch gedrag

$$\chi(\vec{x}) \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} A(k, \cos \theta).$$

Als zo'n oplossing bestaat, is hiermee de verstrooiingsamplitude $A(k, \cos \theta)$ gedefinieerd.

Op pagina 42 in Alfaro en Regge wordt afgeleid dat ($l = \lambda - \frac{1}{2}$)

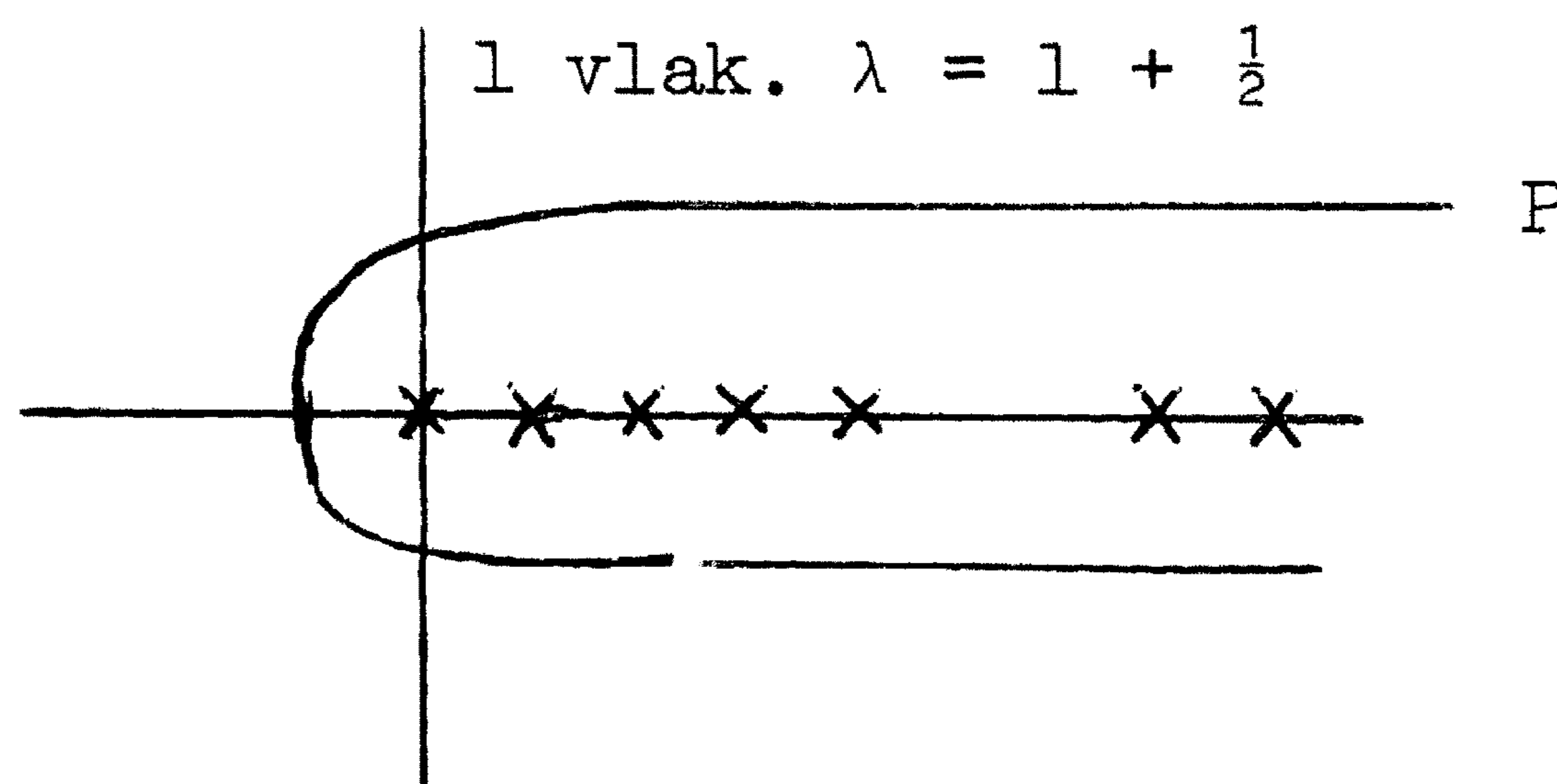
$$A(k, \cos \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [S(\lambda, k) - 1] P_l(\cos \theta).$$

Dit is een ontwikkeling in Legendre polynomen. Hij is convergent binnen een ellips in het complexe $\cos \theta$ vlak. Dit is de z.g. Lehman ellips, zie Alfaro pag. 100, Lehman (1958).

Bovenstaande som is dus ongeschikt om het asymptotisch gedrag voor $\cos \theta \rightarrow \infty$ te bestuderen. Hiertoe schrijven we deze som als een contour integraal

$$A(k, \cos \theta) = \oint (2l+1) \frac{S(\lambda, k) - 1}{2ik} \frac{P_l(\cos \theta)}{\sin \pi l} dl.$$

De contour P loopt om de polen van $\frac{1}{\sin \pi l}$, doch niet om de polen van $S(\lambda, k)$.



Overal in voorgaand verhaal is reeds gebruik gemaakt van $S(\lambda, k)$ voor niet halftallige λ waarden, d.w.z. niet heeltallige l waarden.

Fysisch gezien is $S(\lambda, k)$ alleen gedefinieerd voor gehele l waarden, voortkomend via $\phi(\lambda, k, r)$ en $f(\lambda, k, r)$ uit de differentiaalvergelijking (2.1). Mathematisch is $S(\lambda, k)$ zonder nadere vermelding onmiddellijk voortgezet, deze voortzetting is zo gekozen als de differentiaalvergelijking impliceert.

Deze voortzetting is echter zeker niet uniek. Nemen we in plaats van $S(\lambda, k)$, $S(\lambda, k) (1 + \sin \pi l)$ dan heeft de nieuwe S voor gehele l dezelfde waarde, er zijn onbeperkt veel voortzettingen mogelijk.

Een zekere mate van eenduidigheid zal althans voor Yukawische potentialen uit het volgende blijken.

14. Watson-Sommerfeld transformatie

Vervormen we de contour P zo dat men integreert van $l = -\frac{1}{2} - i\infty$ tot $-\frac{1}{2} + i\infty$ en dan via een grote halve cirkel via $+\infty$ weer naar $-\frac{1}{2} - i\infty$. Althans voor Yukawische potentialen is nu te bewijzen dat de bijdrage van de grote halve cirkel naar nul gaat bij de voortzetting van $S(\lambda, k)$ volgend uit de differentiaalvergelijking. En ook dat dit de enige voortzetting is waarbij dit gebeurt. Indien men deze eis stelt is de voortzetting inderdaad uniek. Zie Newton 1964 pag. 114.

De verstrooiingsamplitude is nu te schrijven als

$$A(k, \cos \theta) = \int_{-i\infty-\frac{1}{2}}^{+i\infty-\frac{1}{2}} (2l+1) \frac{S(\lambda, k)-1}{2ik \sin \pi l} P_l(\cos \theta) dl$$

$$+ \sum_i \frac{(\alpha_i + \frac{1}{2}) \beta_i(k)}{\sin \pi \alpha_i(k)} P_{\alpha_i(k)}(\cos \theta).$$

Hierin is $\alpha_i(k)$ de waarde van l als functie van k waarvoor de i^{de} Reggepool optreedt. $\beta_i(k)$ is het residu van die pool.

In dit geval is het asymptotisch gedrag van $A(k, \cos \theta)$ voor $\cos \theta \rightarrow \infty$ makkelijk te bepalen.

Immers $P_l(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} z^l$.

Zodoende krijgt men voor het asymptotisch gedrag van $A(k, \cos \theta)$ alleen een bijdrage van de meest rechtse Reggepool.

$$A(k, \cos \theta) \underset{\cos \theta \rightarrow \infty}{\sim} \frac{(\alpha + \frac{1}{2}) \beta}{\sin \pi \alpha} (\cos \theta)^\alpha.$$

Waarin α en β respectievelijk de l waarde en het residu van de meest rechtse Reggepool voorstellen.

Berekening van $\alpha_i(k)$, de zogenaamde Regge trajectoriën, is ook om andere redenen zowel mathematisch als fysisch een interessant probleem.

15. Asymptotisch gedrag van $\phi(\lambda, k, r)$

Reeds afgeleid is (10.2)

$$\phi(\lambda, k, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2ik} \left[F(\lambda, k) e^{ikr} - F(\lambda, -k) e^{-ikr} \right].$$

Voor $\text{Im } k < 0$ geldt dan

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \phi(\lambda, k, r) e^{-ikr} = \frac{F(\lambda, k)}{2ik} \quad (15.1)$$

en voor $\text{Im } k \geq 0$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \phi(\lambda, k, r) e^{-ikr} = \frac{F(\lambda, k)}{2ik}$$

dan en slechts dan als $F(\lambda, -k) = 0$, d.w.z. als er een Reggepool is.

16. Reeksontwikkeling voor $\phi(\lambda, k, r)$

Stel $\phi(r) = \varnothing(r) e^{ikr}$.

Substitutie in (2.2) levert

$$\varnothing''(r) + 2ik \varnothing'(r) - \frac{1(1+1)}{r^2} \varnothing(r) - V(r) \varnothing(r) = 0.$$

Nemen we aan dat $V(r)$ ontwikkelbaar is als

$$V(r) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n r^{n-1}$$

en stellen we

$$\varnothing(r) = r^{1+1} \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n$$

dan heeft $\phi(\lambda, k, r) = \varnothing(r) e^{ikr}$ het juiste gedrag in de oorsprong mits $a_0 \neq 0$.

Substitutie in de differentiaalvergelijking levert de recurrente betrekking

$$(r^2 + 2rl + r) a_r + 2ik (1+r) a_{r-1} - \sum_{n=0}^{r-1} v_n a_{r-1-n} = 0.$$

Stel nu eens dat de reeksontwikkeling af zou breken bij n_0 , $a_n = 0$ voor $n > n_0$.

Dit levert dan voor

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \phi(r) = \lim_{r \rightarrow \infty} r^{l+1} P_{n_0}(r) = \infty, P_{n_0} \text{ een polynoom.}$$

Voor $\text{Im } k < 0$ kan dit niet.

Dan geldt immers volgens (15.1)

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \phi(\lambda, k, r) e^{-ikr} = \frac{F(\lambda, k)}{2ik}.$$

Voor $\text{Im } k \geq 0$ kan in principe de reeks wel afbreken, maar dan is er zeker geen Reggepool.

Gaan we uit van de aanwezigheid van een Reggepool met $\text{Im } k \geq 0$ dan zal de reeksontwikkeling niet afbreken.

Dit is in tegenspraak met een artikel van Lovelace en Masson (1962) waarin beweerd wordt dat er bij een afbrekende reeksontwikkeling zeker een Reggepool is.

Dit laatste is weliswaar het geval bij de Coulombpotentiaal, maar die voldoet niet aan een van de elementairste eisen opgelegd aan de potentiaal,

$$\int_c^\infty \frac{1}{r} dr \text{ divergeert.}$$

Op de Coulombpotentiaal is boven besproken asymptotisch gedrag dus niet van toepassing.

17. Over de berekening van Reggepolen

De methode die Lovelace en Masson gebruiken om Regge trajectoriën te berekenen is, hoewel mathematisch niet goed gefundeerd, zeer interessant vanwege zijn eenvoud en resultaten. Hij berust op de ontwikkeling van $\phi(\lambda, k, r)$ in een dubbel reeks van machten van k en r .

Schrödingervergelijking:

$$\psi^k(r) + [k^2 - \frac{1(1+1)}{r^2} - V(r)] \psi(r) = 0$$

substitutie $\psi(r) = r^{1+1} e^{ikr} \chi(r)$ en $z = -2ikr$, $K = ik$

$$U(r) = r V(r)$$

$$U(r) = 2 \sum_{t=0}^{\infty} M_t (-2r)^t$$

$$\chi^{(n)}(z, K) = \sum_{p,m=1}^{\infty} F_{p,m}^n K^{-p} z^m.$$

χ^n is de functie behorend bij de n^{de} Reggepool.

Voor de l waarde behorend bij de n^{de} trajectorie, schrijft Lovelace

$$\alpha_n(K) = -n + \sum_{p=1}^{\infty} c_p^n K^{-p}.$$

Dit alles levert een ingewikkelde recurrente betrekking voor de $F_{p,m}^n$, afhankelijk van c_t^n en M_t . Hieruit blijkt dat bij gegeven potentiaal (M_t) er geen keuze van c_t^n mogelijk is zodat de reeks $\chi^n(z, K)$ in machten van z geheel afbreekt.

Dit is in overeenstemming met hier eerder besproken resultaten.

Wel blijkt het mogelijk te zijn c_t^n zó te kiezen dat voor

$$m > m_0(p, n), F_{p,m}^n = 0.$$

Dat wil zeggen dat bij vaste machten van k de termen in machten van z afbreken. Dus dan is χ te schrijven als een som van polynomen in z . Lovelace concludeert nu op duistere gronden dat dit geval overeen komt met de aanwezigheid van een Reggepool.

Hij berekent langs iteratieve weg de coëfficiënten waarvoor dit zo is. Zo construeert hij Reggepool trajectoriën en verkrijgt een resultaat dat voor zover controleerbaar niet onjuist is.

Geraadpleegde literatuur

- | | |
|--|---|
| Alfaro, V. de and T. Regge | Potential scattering, 1965. |
| Bottino, A.; A.M. Longoni and T. Regge | Nuove Cim. 23, pag. 954, 1962. |
| Frautschi, S. | Regge poles and S matrix theory, 1963. |
| Lehmann, N. | N. Cim. 10, 579, 1958. |
| Lovelace, C. and D. Masson | Calculation of Regge poles by continued fractions. N. Cim. 26, 472, 1962. |
| Mandalstam, S. | An extension of the Regge formula, Annals of Physics 19, 254, 1959. |
| Regge, T. | N. Cim. 14, 951, 1959. |
| Regge, T. | Bound States, Shadow states and Mandalstam representation. N. Cim. 28, 947, 1960. |
| Newton, R.G. | The complex j plane, 1966. |
| Bockner, S. and W.T. Martin | Several complex variables, 1948. |