SZÓRÁSELMÉLET: MATEMATIKAI ALAPOK ÉS NÉHÁNY AKTUÁLIS KÉRDÉS

HORVÁTH MIKLÓS

A dolgozatban bemutatjuk az alkalmazások egész sorában fontos szerepet játszó szóráselmélethez tartozó matematikai apparátus egy részét, a témakörrel való első ismerkedésre is alkalmas tárgyalásban. A dolgozat második részében részletesebben megismerkedünk a kvantummechanikai potenciálszórás néhány aspektusával, ismertetve néhány új eredményt és nyitott kérdéseket is.

1. Bevezetés

Az internetes böngészőkben a „scattering" keresőkérdésre és változataira kapott több millió találat minden előismeret nélkül is mutatja, hogy a szórási feladatok a tudomány, a technika és a mindennapi élet számos területén felbukkannak. A szórási feladatok közös sajátsága, hogy egy vizsgálandó ismeretlen objektumra hullámokat bocsátunk és a visszaverődő (szórt) hullámokat megfigyeljük. A hullám lehet például hanghullám, amely egy közegben, vagy akár a vizsgált objektum belsejében terjed, lehet elektromágneses hullám, illetve kvantummechanikai szórási feladatok esetén a részecske-hullám ekvivalenciának megfelelően lehet egy vizsgálandó anyagra irányított részecskenyaláb is. A direkt szórási feladatban ismert objektum esetén kívánjuk a visszavert hullámot meghatározni. Az alkalmazások szempontjából nagy jelentőségű az inverz szórási feladat, amelyben a szórt hullám megfigyeléséből következtetünk az ismeretlen objektum tulajdonságaira, pl. elhelyezkedésére, alakjára, belső szerkezetére, részecskékkel bombázott anyag esetén az anyag tulajdonságaira. A leginkább hétköznapi inverz szórási feladat a látás, amely során a tárgyakról a szemünkbe jutott visszavert fény alapján agyunk megállapítja a minket körülvevő tárgyak elhelyezkedését, színét, távolságát stb. A legtöbb inverz szórási feladat azért nagy jelentőségű, mert ezzel olyan információkat szerezhetünk, melyek közvetlenül csak nehezen, vagy egyáltalán nem elérhetők. Az elektromágneses hullámok szóródásán alapul például a radar technológia. Hanghullámok visszaverődésének érzékelésével tájékozódik rossz látási viszonyok esetén például a denevér és a delfin, ezen az elven működik a szonár. Ilyen technológiák nyújtanak segítséget pl. a tengerfenék feltérképezése során. Az ultrahangos orvosi vizsgálatban belső szerveink elhelyezkedéséről nyerünk információt arra a tényre támaszkodva, hogy a különböző szövetekben más sebességgel terjednek a rezgések. Hasonló elven alapulnak például olyan geológiai kutatások, ahol mesterségesen keltett rezgések visszaverődésének méréséből lehet következtetni a földfelszín alatti struktúrákra. A radar technológia is alkalmazható bizonyos földfelszín alatti struktúrák vizsgálatára. A roncsolásmentes anyagvizsgálat a rejtett hibák olyan módon történő felderítését jelenti, amely nem károsítja a vizsgált anyagot, illetve terméket. Az elnevezés módszerek egész sokaságát fedi, melyek között szóráselméleti alkalmazások is vannak. Az elemi részecskék közti kölcsönhatások vizsgálata a rendkívül kis méretek következtében nem könnyű feladat. Az egyik elterjedt módszer az inverz szórási eljárás: részecskenyalábot bocsátunk a vizsgálandó anyagra. A belőtt részecskék kölcsönhatásba lépnek az anyagot alkotó molekulák, vagy atomok erőterével, majd különböző irányokba visszaverődnek. Az egyes irányokba egységnyi idő alatt visszaverődő részecskék alkalmasan elhelyezett detektorokkal számlálhatók, és ezekből a szórási adatokból a következőkben bemutatott matematikai apparátussal információkat nyerhetünk a vizsgált atomok, vagy molekulák tulajdonságairól.

A szórási feladatok témakörének elmélete és alkalmazási területei egyaránt olyan óriási mennyiségű információtömeget jelentenek, melynek áttekintésére jelen dolgozatban még kísérletet sem érdemes tenni. Célunk mindössze az, hogy ízelítőt adjunk ennek a rendkívül érdekes és sokrétűen hasznosított területnek az alapjaiból, és legalább egy részterületen, a kvantummechanikai potenciálszórás témájában eljussunk aktuális kutatási kérdésekhez is. A továbbiakban a szórási feladatoknak csak a matematikai aspektusaival foglalkozunk. A nagy terjedelmet igénylő matematikai precizitás helyett az alapvető gondolatok és konstrukciók heurisztikus bemutatására törekszünk; az alaposabb tárgyalás iránt érdeklődőknek ajánljuk többek között az [1, 3, 19, 4, 5, 14, 15, 16, 18, 22, 23, 26] és [27] monográfiákat. A szóráselmélet kétféle felépítése közül az időfüggetlen elméletet választjuk. Az időfüggő felépítés iránt érdeklődőknek többek között ajánlhatjuk Teschl [25] monográfiájának 12. fejezetét; a könyv az alapoktól indulva felépíti a szóráselmélethez szükséges matematikai hátteret is.

2. A szórás matematikai leírása

Első példa: akusztikus szórás egy objektumon

Vegyünk egy $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ korlátos tartományt (testet) a háromdimenziós térben. Tegyük fel, hogy a test egy homogén izotróp közegbe van beágyazva, azaz a közegben a hanghullámok minden irányban azonos c sebességgel terjednek. A hullámterjedést jó közelítéssel az

$$\frac{1}{c^2}U_{tt} = \Delta U, \quad U = U(t,x) \tag{1}$$

hullámegyenlet írja le, ahol $\Delta = \partial^2_{x_1} + \partial^2_{x_2} + \partial^2_{x_3}$ a Laplace-operátor és $v = 1/\varrho_0 \mathrm{grad} U$ a hanghullám sebességvektora, ϱ_0 a közeg sűrűsége. A közeg tulajdonságai miatt időben harmonikus megoldást keresünk, azaz

$$U(t,x) = \Re(u(x)e^{-i\omega t}) \tag{2}$$

alakú megoldást. A (2) képletet (1)-be helyettesítve egyszerű számolás adja az időfüggetlen

$$\Delta u + k^2 u = 0 \tag{3}$$

Helmholtz-egyenletet az Ω tartomány komplementerén, ahol $k = \omega/c$. A továbbiakban feltesszük, hogy a rezgések nem hatolnak az Ω test belsejébe. A test felületi tulajdonságai befolyásolják a hanghullámok visszaverődését. Teljesen puha felületű test esetén a nyomás a test felületén nulla, amit matematikailag az

$$u|_{\partial\Omega} = 0$$

Dirichlet-peremfeltétel fejez ki, nagyon kemény felületű test esetén pedig a hanghullám sebességvektorának nem lehet az Ω határára merőleges komponense, amit a

$$\frac{\partial u}{\partial \nu}|_{\partial\Omega} = 0$$

Neumann-peremfeltétel ír le, ahol ν az Ω határára merőleges külső egységvektor. Legyen $d \in \mathbb{R}^3$ egy egységvektor. Az $u_i(x) = e^{ikx \cdot d}$ olyan megoldása a Helmholtz-egyenletnek, mely a d irányba haladó síkhullámot írja le. Keressük a visszaverődött hullámot leíró u_s megoldást. Tapasztalataink szerint a visszaverődött (víz-)hullámok a szóródás helyétől távolodva közelítőleg kör alakban terjednek és lecsengenek. Egyszerűen kiszámolható, hogy az $r = |x|$ jelölés mellett az

$$\frac{e^{ikr}}{r} \text{ és } \frac{e^{-ikr}}{r}$$

függvények is megoldásai a (3) Helmholtz-egyenletnek. Az első esetben

$$U(t,x) = \Re\left(\frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\omega t}\right),$$

a számláló növekvő t esetén növekvő $r = |x|$ mellett lesz konstans, vagyis a szórt hullám az időben „szétfolyik”; míg a második esetben éppen ellenkezőleg, növő t-hez csökkenő $|x|$ tartozik, mintha egy hullámfront az időben egyre kisebb helyre koncentrálódna. Az utóbbi eset tehát, jóllehet matematikailag kifogástalan megoldása a Helmholtz-egyenletnek, a valóságban nem fordul elő. Milyen módon lehet az ilyen megoldásokat kizárni? Vegyük észre, hogy

$$\frac{d}{dr}\frac{e^{ikr}}{r} = ik\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r^2},$$

tehát nagy r esetén a derivált majdnem pontosan egyenlő a függvény ik-szorosával, míg $\frac{e^{-ikr}}{r}$ deriváltja majdnem pontosan a függvény $-ik$-szorosa lesz. Ezért a

$$\lim_{r\to\infty} r\left(\frac{\partial u_s}{\partial r} - iku_s\right) = 0 \tag{4}$$

Sommerfeld sugárzási feltétel megengedi az $\frac{e^{ikr}}{r}$ típusú és kizárja az $\frac{e^{-ikr}}{r}$ típusú megoldásokat, vagyis azt biztosítja, hogy a szórt hullám az időben szétterjedjen.

A fenti feltételek együttesen már matematikailag is egyértelműen meghatározzák a ténylegesen lejátszódó folyamatnak megfelelő u függvényt:

2.1. Tétel. *Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ egy sima határú korlátos tartomány és $\alpha \in \mathbb{R}^3$ egy egységvektor. Akkor a $\Delta u + k^2 u = 0,\ x \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}$ Helmholtz-egyenletnek az $u|_{\partial\Omega} = 0$ (vagy a $\frac{\partial u}{\partial \nu}|_{\partial\Omega} = 0$) peremfeltétel mellett létezik pontosan egy $u = u_i + u_s$ alakú megoldása, ahol*

$$u_i(x) = e^{ik\alpha\cdot x}$$

az α irányból érkező síkhullám, és az u_s szórt hullámra teljesül a (4) Sommerfeld sugárzási feltétel. A szórt hullám aszimptotikus viselkedése

$$u_s(x) = \frac{e^{ikr}}{r} A(\hat{x}, \alpha, k) + \mathbf{O}\left(\frac{1}{r^2}\right), \quad r = |x| \to \infty,\ \hat{x} = x/r. \tag{5}$$

A bizonyítással és a feltételek pontosabb megfogalmazásával itt nem foglalkozunk, ezek megtalálhatók többek között a Colton-Kress [4] monográfia 3.2. alfejezetében, illetve Ramm [22] 4.2. alfejezetében.

Az (5) egyenlet azt fejezi ki, hogy nagy távolságban a visszavert hullám közelítőleg gömb alakú, de az $\hat{x}$ irányoktól függő amplitúdóval. Ezért az itt szereplő $A(\hat{x}, \alpha, k)$ komplex számot *szórási amplitúdónak* nevezzük. Mivel a szórásamplitúdó a visszavert hullám mérésével meghatározható, ez a függvény lett a szóráselmélet központi fogalma. Az *inverz szórási feladat* ebben a kontextusban azt jelenti, hogy a szórásamplitúdó ismeretében határozzuk meg az Ω test helyzetét és alakját. Ismert, hogy az Ω test biztosan rekonstruálható végtelen sok különböző α beesési szöghöz tartozó szórásamplitúdóból, de véges sok, akár egyetlen beesési szöghöz tartozó szórásamplitúdó alapján is lehet rekonstruálható, ha közelítőleg ismerjük azt a tartományt, amelyen belül Ω-nak lennie kell, lásd Colton-Kress [4], 5.1. alfejezet és Ramm [22] 4.2. alfejezet.

Második példa: akusztikus szórás inhomogén közegben

Ebben a feladatban a hanghullámok az egész térben terjednek. A homogén befogadó közegben a hangsebesség c_0, míg a tér egy korlátos részében a közeg inhomogén, tehát az x pontbeli hangsebesség $c(x)$ értéke a helytől függ. Az

$$n(x) = \frac{c_0^2}{c(x)^2}$$

függvényt *refrakciós indexnek* nevezzük. A hullámegyenletből inhomogén közeg esetén a

$$\Delta u + k^2 n(x)u = 0,\ x \in \mathbb{R}^3$$

egyenlet adódik. Az előző példa mintájára a feltételek részletezése és bizonyítás nélkül megemlítjük a következő eredményt:

2.2. TÉTEL. *Legyen $\alpha \in \mathbb{R}^3$ egy egységvektor, és tegyük fel, hogy az $n(x) > 0$ refrakciós indexre $n(x)=1$ egy korlátos halmazon kívül. Akkor a $\Delta u + k^2 n(x)u=0$ $x \in \mathbb{R}^3$ egyenletnek létezik pontosan egy $u = u_i + u_s$ alakú megoldása, ahol*

$$u_i(x) = e^{ik\alpha\cdot x}$$

az α irányból érkező síkhullám, és az u_s szórt hullámra teljesül a (4) Sommerfeld sugárzási feltétel. Erre az u_s-re

$$u_s(x) = \frac{e^{ikr}}{r} A(\hat{x}, \alpha, k) + \mathbf{O}\left(\frac{1}{r^2}\right), \quad r = |x| \to \infty,\ \hat{x} = x/r.$$

Az inverz feladat most a szórásamplitúdóból az $n(x)$ refrakciós index meghatározása. Ilyen módon feltárható a hanghullámok által átjárt tartomány belső szerkezete, a hangot egyformán vezető résztartományok alakja. Az ezzel kapcsolatos klasszikus eredményekről jó összefoglaló található Colton-Kress [4] 1.2. alfejezetében.

Harmadik példa: potenciálszórás a kvantummechanikában

Ahogy korábban is említettük, itt arra a jelenségre illesztünk matematikai modellt, amikor egy α irányból k^2 energiájú elemi részecskékkel valamilyen anyagot bombázunk, számoljuk a különböző irányokba visszaverődő részecskéket, és ezekből az adatokból vonunk le következtetéseket az anyag tulajdonságaira. A jelenséget leíró $u(x)$ hullámfüggvény eleget tesz a

$$-\Delta u + V(x)u = k^2 u,\ x \in \mathbb{R}^3 \tag{6}$$

Schrödinger-egyenletnek. Itt $V(x)$ a vizsgált anyag atomjainak, vagy molekuláinak erőteréből számolt potenciális energia, rövidebben potenciál. Mivel a kvantummechanikai erők nagyon kis hatósugarúak, az alkalmazások szempontjából fontos esetekben általában feltehető, hogy a potenciál gyorsan tart nullához, ha $r = |x| \to \infty$. A korábban tárgyalt esetekkel analóg állítás itt is igaz:

2.3. TÉTEL. *Legyen $\alpha \in \mathbb{R}^3$ egy egységvektor, és tegyük fel, hogy a $V(x)$ potenciál gyorsan lecseng $|x| \to \infty$ esetén. Akkor a $-\Delta u + V(x)u = k^2 u,\ x \in \mathbb{R}^3$ egyenletnek létezik pontosan egy $u = u_i + u_s$ alakú megoldása, ahol*

$$u_i(x) = e^{ik\alpha\cdot x},$$

és u_s-re teljesül a (4) Sommerfeld sugárzási feltétel. Erre az u_s-re fennáll, hogy

$$u_s(x) = \frac{e^{ikr}}{r} A(\hat{x}, \alpha, k) + \mathbf{O}\left(\frac{1}{r^2}\right), \quad r = |x| \to \infty, \ \hat{x} = x/r.$$

Megjegyezzük, hogy most az $A(\hat{x}, \alpha, k)$ szórásamplitúdó helyett csak a $\sigma = |A|^2$ *hatáskeresztmetszet* mérhető közvetlenül, ugyanis a $\Delta\hat{x}$ térszögbe egységnyi idő alatt visszaverődött részecskék száma $\Delta\hat{x}|A|^2$-tel arányos. Ismert ugyanakkor, hogy $|A|$ ismeretében az A szórásamplitúdó meghatározható, ld. Chadan-Sabatier [3] X. fejezetében. Ezért a továbbiakban A-t ismertnek tételezzük fel, az inverz feladat pedig A ismeretében a $V(x)$ potenciál meghatározása. Ezzel a témakörrel bővebben foglalkozunk a következő részben egy szimmetriafeltevés mellett.

3. Potenciálszórás gömbszimmetrikus potenciál esetén

A továbbiakban külön említés nélkül mindig feltesszük, hogy a vizsgált anyag részecskéinek erőtere gömbszimmetrikus, és emiatt a $V(x)$ potenciálfüggvény is csak $|x|$-től függ:

$$V(x) = q(r), \quad r = |x|.$$

A szimmetria kiaknázására érdemes áttérni az

$$x = (r\sin\theta\cos\varphi, r\sin\theta\sin\varphi, r\cos\theta)$$

gömbi koordinátákra.

A radiális Schrödinger-operátor és a fázistolások

Egy $Y(\theta, \varphi)$ függvényt *n-edrendű gömbi harmonikus függvénynek* nevezünk, ha az $f(x) = r^n Y(\theta, \varphi)$ függvény harmonikus, azaz $\Delta f = 0$. Ismert, hogy az n-edrendű gömbi harmonikusok $2n+1$-dimenziós teret alkotnak, és az alkalmasan választott Y_n^m, $m = -n, \dots, n$ gömbi harmonikusok az összes $n \geq 0$ indexre együttesen ortonormált bázist alkotnak az egységgömb felületén négyzetesen integrálható függvények terében, $L_2(S)$-ben. A változók szétválasztásának elvét követve keressük a (6) Schrödinger-egyenlet megoldását

$$u(x) = \frac{\psi_n(r)}{r} Y_n^m(\theta, \varphi), \ r = |x|$$

alakban. Felhasználva a Laplace-operátor gömbi koordinátákkal felírt alakját, a radiális változóban a

$$-\psi_n''(r) + \left(q(r) + \frac{n(n+1)}{r^2}\right)\psi_n(r) = k^2\psi_n(r), \ r \geq 0$$

radiális Schrödinger-egyenlet adódik. Ez egy másodrendű lineáris közönséges differenciálegyenlet, ezért a megoldásai kétdimenziós vektorteret alkotnak. Vizsgáljuk meg heurisztikusan a megoldások viselkedését $r \to 0+$ és $r \to \infty$ esetén. Az első esetben $\frac{n(n+1)}{r^2}$ domináns, tehát közelítőleg a $\psi_n''(r) = \frac{n(n+1)}{r^2}\psi_n(r)$ egyenlet adódik, melynek megoldásai r^{n+1} és r^{-n} lineáris kombinációi. Ebben csak az első megoldás szerepelhet, máskülönben a kapott $u(x)$ megoldás szinguláris lenne az origóban. Az $r \to \infty$ esetben a potenciál lecsengése miatt közelítőleg a $-\psi_n'' = k^2\psi_n$ egyenletet kapjuk, ezért ψ_n aszimptotikusan $\sin kr$ és $\cos kr$ lineáris kombinációja lesz. A paraméterek alkalmas választásával tehát feltehető, hogy

$$\psi_n(r) = \begin{cases} c_n r^{n+1}(1 + \mathbf{o}(1)), & r \to 0+, \\ \sin(kr - n\pi/2 + \delta_n) + \mathbf{o}(1), & r \to \infty. \end{cases} \tag{7}$$

A szinuszfüggvény fázisát azért célszerű az itt megadott módon beállítani, mert így a $q = 0$ potenciálhoz a $\delta_n = 0$ értékek tartoznak (és $\psi_n(r) = \sqrt{\pi kr/2}J_{n+1/2}(kr) = krj_n(kr)$, ahol $J_{n+1/2}$ a Bessel-függvényt, j_n pedig a szférikus Bessel-függvényt jelöli). Ezért a potenciál jelenlétének aszimptotikusan az egyetlen következménye, hogy a szinuszfüggvény fázisa eltolódik egy δ_n-nel jelölt konstanssal, amelyet az *n-edik fázistolásnak* nevezünk. A fázistolások sorozata is központi jelentőségű a potenciálszórás elméletében. A (7) formula a δ_n számokat csak modulo π definiálja, de a definíció egyértelművé tehető, ha feltesszük, hogy a nulla potenciálhoz nulla fázistolások tartoznak, és hogy a fázistolások a q potenciál folytonos függvényei.

A szórásamplitúdó felírása a fázistolásokkal

A $P_n(t)$ *Legendre-polinomokat* a szokásos

$$P_n(t) = \frac{1}{2^n n!}\left[(t^2 - 1)^n\right]^{(n)}$$

képlettel definiáljuk. Bebizonyítható, hogy a változók szétválasztásának imént bemutatott módszerével a 2.3. Tételben leírt $u(x)$ hullámfüggvény felírható a következő alakban:

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n e^{i\delta_n} \frac{2n+1}{k} \frac{\psi_n(r)}{r} P_n(\hat{x} \cdot \alpha), \tag{8}$$

speciálisan a potenciálmentes $q = 0$ esetben

$$e^{ikx\cdot\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) j_n(kr) P_n(\hat{x} \cdot \alpha). \tag{9}$$

Ezek bizonyítása megtalálható például Newton [18] monográfiájának 11.1.1. alfejezetében, itt nem részletezzük. Ezen képletek felhasználásával már egyszerűen nyerhetünk egy fontos kapcsolatot a δ_n-ek és a szórásamplitúdó között:

3.1. TÉTEL. *A szórásamplitúdó felírása a fázistolásokkal:*

$$A(\hat{x},\alpha,k)=\frac{1}{k}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)e^{i\delta_n}\sin\delta_n P_n(\hat{x}\cdot\alpha). \tag{10}$$

Bizonyítás. Vezessük be a $\approx$ jelölést az $r\to\infty$-ben vett aszimptotikus egyenlőségre. A (8) és a (9) formulák kivonása után (7) behelyettesítésével azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}u_s(x)&=u(x)-e^{ikx\cdot\alpha}\\&=\sum_{n=0}^{\infty}i^n\Big(e^{i\delta_n}\frac{\psi_n(r)}{kr}-j_n(kr)\Big)(2n+1)P_n(\hat{x}\cdot\alpha)\\&\approx\sum_{n=0}^{\infty}i^n\frac{e^{i\delta_n}\sin(kr-n\pi/2+\delta_n)-\sin(kr-n\pi/2)}{kr}(2n+1)P_n(\hat{x}\cdot\alpha).\end{aligned}$$

A számlálót a könnyen ellenőrizhető

$$e^{i\delta_n}\cos\delta_n-1=ie^{i\delta_n}\sin\delta_n$$

trigonometrikus azonosság felhasználásával egyszerűbb alakra hozhatjuk:

$$\begin{aligned}&e^{i\delta_n}\sin(kr-n\pi/2+\delta_n)-\sin(kr-n\pi/2)\\=&\sin(kr-n\pi/2)(e^{i\delta_n}\cos\delta_n-1)+\cos(kr-n\pi/2)e^{i\delta_n}\sin\delta_n\\=&e^{i(kr-n\pi/2)}e^{i\delta_n}\sin\delta_n=e^{ikr}i^{-n}e^{i\delta_n}\sin\delta_n.\end{aligned}$$

Ezért

$$u_s(x)\approx\frac{e^{ikr}}{kr}\sum_{n=0}^{\infty}e^{i\delta_n}\sin\delta_n(2n+1)P_n(\hat{x}\cdot\alpha),$$

ami bizonyítja a (10) formulát. □

A bizonyított képlet mutatja, hogy az $\hat{x}$ irányban való szóródás amplitúdója csak az $\hat{x}$ és a beeső részecskenyaláb α iránya közt bezárt szögtől függ; ez egyébként a potenciál gömbszimmetriájából is következik. Mivel a Legendre-polinomok ortogonális bázist alkotnak a $[-1,1]$ szakaszon négyzetesen integrálható függvények körében, a (10) formulára úgy is tekinthetünk, mint a szórásamplitúdó ortogonális sorfejtésére a Legendre-polinomok szerint. Ezért a modulo π vett δ_n sorozat és a szórásamplitúdó kölcsönösen meghatározzák egymást, így az inverz szórási feladat átfogalmazható úgy is, hogy a modulo π megadott fázistolás-sorozatból határozzuk meg a $q(r)$ pontenciált.

Unicitási és stabilitási kérdések

A fázistolások biztosan meghatározzák a potenciált, ha a potenciál nagyon gyorsan lecseng a végtelenben, vagy akár azonosan nulla nagy távolságban. Kompakt tartójú potenciálokra unicitást Loeffel [17] igazolt. Ugyanakkor $r^{-3/2}$-rendű lecsengés esetén már nincs unicitás, lehet konstruálni olyan *transzparens potenciálokat*, melyekre az összes fázistolás nulla, lásd Newton [18], 20.4. alfejezet.

A következő állítás szerint kompakt tartójú potenciálokat már a fázistolások egy „kis” részsorozata meghatároz:

3.2. TÉTEL. *Ramm, [20] Ha $q(r) = 0$, $r > a$-ra, és $rq(r) \in L_2(0, a)$, akkor*

$$\sum_{n \in L, n \neq 0} \frac{1}{n} = \infty \Rightarrow \{\delta_n : n \in L\} \text{ meghatározza } q\text{-t.}$$

Vagyis akár az összes fázistolást eldobhatjuk egy nulla sűrűségű indexsorozatot leszámítva; ha a meghagyott indexek reciprokösszege végtelen, a meghagyott fázistolások is csak egy potenciálhoz tartozhatnak. A [8] dolgozatban megmutattam, hogy az állítás a bővebb L_1 térben is igaz és egy „kicsit” nagyobb térben a feltétel szükséges lesz, azaz a feltétel megsértésével az unicitás elveszik:

3.3. TÉTEL. *Horváth [8] Az előző tétel állítása $q(r) = 0$, $r > a$-ra, és $rq(r) \in L_1(0, a)$ feltevés mellett is érvényes. Másrészt legyen $0 < \sigma < 2$ esetén*

$$B_\sigma = \{q : q(r) = 0, \text{ ha } r > a, r^{1-\sigma} q(r) \in L_1(0, a)\}.$$

Ha

$$\sum_{n \in L, n \neq 0} \frac{1}{n} < \infty,$$

akkor bármely $q \in B_\sigma$-hoz van egy különböző $q^* \in B_\sigma$, amelyre

$$\delta_n(q) = \delta_n(q^*), \quad \forall n \in L.$$

A bizonyítás alapgondolata a $\psi_n(r) = \sqrt{r} y_n(\log(a/r))$ változótranszformáció, amely az inverz szórási feladatot inverz sajátérték-feladatba viszi át, ezzel a sajátérték-feladatokra kidolgozott apparátus elérhetővé válik inverz szórási feladatok megoldására.

Konkrét inverziós eljárásokkal kapcsolatban megemlíthető az Apagyi, Horváth [2] cikk, ahol a nevezetes Gelfand–Levitan–Marchenko-integrálegyenlet magfüggvényét egy momentumfeladat megoldásaként közelítettük és az Apagyi, Horváth, Pálmai [13] dolgozat, ahol a Cox-Thompson inverziós módszer egy változatát vizsgáltuk.

Az inverz szórási feladatok unicitás esetén is csak gyengén stabilak. Egy tipikus eredmény, hogy ha a bemenő adatok hibája $|\delta_n(q) - \delta_n(q^*)| < \varepsilon$, akkor a $q - q^*$

eltérés valamilyen normában egy $\log\varepsilon$-t tartalmazó kifejezéssel becsülhető. Ez azt jelenti, hogy hiába javul radikálisan a bemenő adatok pontossága, a megtalált potenciál hibakorlátja alig változik. Egy ilyen eredmény és az előzményekről egy áttekintés olvasható a [11] dolgozatban:

3.4. Tétel. *(Horváth and Kiss [11]) Legyen $D > 0$ és tegyük fel, hogy $r|q(r)| \le D$, $\int_0^a |d(r^2 q(r))| \le D$, és hasonlóan q^*-ra. Ha*

$$\left(\frac{2n}{ae}\right)^{2n} |\sin(\delta_n(q^*) - \delta_n(q))| < \varepsilon, \quad \forall n \le N,$$

akkor

$$\|r^2(q^*(r) - q(r))\|_{L_2(0,a)} \le c\left[\frac{1}{\sqrt{N}} + \left(\log\frac{1}{\varepsilon}\right)^{-1/2}\right].$$

Itt tehát némileg realisztikusabban nem az összes fázistolásról, hanem csak az első néhányról tesszük fel, hogy ismerjük kis hibával. A kapott hibabecslés elég szegényes. A bemenő adatok hibájánál szereplő szorzótényező láttán feltételezhető, hogy a fázistolások nagyon gyorsan tartanak nullához. Ilyen kérdéseket tárgyalunk a következő részben.

A fázistolások sorozatának matematikai tulajdonságai

Nagyon érdekes lenne egy egyszerű belső jellemzés a δ_n sorozatokra, azaz megmondani, melyek azok a sorozatok, amelyek előállnak egy potenciál fázistolásaiként. Ettől feltehetően még messze vagyunk (Loeffel [17] cikkében a kompakt tartójú potenciálok fázistolásaira adott egy komplikált leírást), de a sorozat tagjainak eloszlására nézve vannak eredmények, ezek közül tárgyalunk néhányat.

Az egyszerűség kedvéért legyen $k = 1$. Kompakt tartójú potenciálra a fázistolások gyors csökkenését mondja ki a következő

3.5. Tétel. *(Ramm [21]) Ha $rq(r) \in L_2(0,a)$, $q = 0$, ha $r > a$, és q konstans előjelű valamilyen $(a - \varepsilon, a)$ szakaszon, akkor*

$$\lim_{n\to\infty} n|\delta_n|^{1/(2n)} = \frac{ae}{2}.$$

Az állítás következő kiterjesztése azt mondja, hogy ha a fázistolások eltérése elegendően kicsi, akkor a két potenciál megegyezik nagy r-ekre:

3.6. Tétel. *(Horváth [10]) Legyen $rq(r)$, $rq^*(r) \in L_1(0,\infty)$.*
a) Ha $q = q^*$ m.m. (a,∞)-en, akkor minden elég nagy n indexre

$$|\delta_n - \delta_n^*| \le \frac{c}{n^2}\left(\frac{ae}{2n}\right)^{2n}.$$

b) Megfordítva, ha q és q^* kompakt tartójú, $rq(r)$, $rq^*(r) \in L_1(0,\infty)$, és

$$\delta_n - \delta_n^* = \mathbf{O}\left(\left(\frac{a_1 e}{2n}\right)^{2n}\right), \quad n \to \infty$$

teljesül minden $a_1 > a$-ra, akkor $q = q^*$ m.m. (a,∞)-en.

A szórási amplitúdók eltérésére vonatkozó analóg állítás kimondásához legyen

$$F(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) e^{i\delta_n} \sin \delta_n P_n(t)$$

a szórási amplitúdó rövidebb jelölése.

3.7. Tétel. *(Horváth [10]) Legyen $rq(r)$, $rq^*(r) \in L_1(0,\infty)$, és $0 < a < \infty$.*
a) Ha $q = q^*$ m.m. (a,∞)-en, akkor $F(t) - F^*(t)$ a t komplex változóban egész függvény, és

$$|F(t) - F^*(t)| \le c(1 + |t|) \exp(a\sqrt{2|t|}).$$

b) Fordítva, ha q és q^* kompakt tartójú, $F(t) - F^*(t)$ egész függvény, és

$$F(t) - F^*(t) = \mathbf{O}\left(\exp(a_1\sqrt{2|t|})\right)$$

teljesül minden $a_1 > a$ esetén, akkor $q = q^*$ m.m. (a,∞)-en.

A fázistolások eloszlását illetően említünk végül néhány eredményt. Régóta ismert, hogy

$$\delta_{n+1} - \delta_n < \pi/2$$

(Regge [24]). A potenciál kis változásánál a fázistolások változását jellemzi a

$$-\dot{\delta}_n = \int_0^{\infty} \dot{q}\psi_n^2$$

variációs formula ([6, 9]). Eszerint q növelésével a fázistolások csökkennek, q csökkenésével pedig nőnek. Ennek felhasználásával igazolhatók a következő pontos alsó és felső becslések:

3.8. Tétel. *(Horváth [9]) Legyen $rq(r) \in L_1(0,a)$, $q = 0$ m.m. (a,∞)-en. Akkor*

$$\begin{aligned} -a &< \delta_0 < \infty, \\ -a + \arctan a &< \delta_1 < \infty, \\ \frac{\pi}{2} - a + \arctan \frac{a^2-3}{3a} &< \delta_2 < \infty, \end{aligned}$$

és általában

$$\arctan\frac{J_{n+1/2}(a)}{Y_{n+1/2}(a)} - k\pi < \delta_n < \infty,$$

ahol $Y_{n+1/2}$ *másodfajú Bessel-függvény, és* k *az* $Y_{n+1/2}$ *gyökeinek száma* $(0,a)$*-n. A becslések nem javíthatók.*

Ha további információink vannak a potenciálról, akkor jobb becslések is igazak:

3.9. Tétel. *(Horváth [7]) Az előző tétel feltételein túl tegyük fel, hogy* $q(r) \le 1$ *m.m.* $(0,a)$*-n. Akkor*

$$\int_0^a r(1-q(r))\,dr < 1 \Rightarrow \arctan a - a \le \delta_0 < \pi - a,$$
$$\int_0^a r(1-q(r))\,dr < 3 \Rightarrow \frac{\pi}{2} - a + \arctan\frac{a^2-3}{3a} \le \delta_1 < \pi - a + \arctan a.$$

3.10. Tétel. *(Horváth [7]) Legyen* $rq(r) \in L_1(0,a)$, $q = 0$ *m.m.* (a,∞)*-en. Akkor*

$$\int_0^a r|1-q(r)|\,dr < 1 \text{ esetén } \frac{a^2}{1-a\cot(\delta_1+a)} > 1 + a\cot(\delta_0+a).$$

Ha még $q \le 1$ *is igaz m.m., akkor*

$$\frac{a^2}{1-a\cot(\delta_1+a)} \ge 2 + a\cot(\delta_0+a),$$

és egyenlőség pontosan akkor áll fenn, ha $q = 1$ *m.m.* $(0,a)$*-n.*

A δ_0 és δ_1 közti arányosság becslését jelenleg is vizsgáljuk:

3.11. Tétel. *(Horváth and Sáfár [12]) Legyen* $0 < b < a < \pi/2$, $\operatorname{supp} q \subset [b,a]$, $q \ge 0$ *m.m.*, $rq(r) \in L_1(b,a)$*. Akkor*

$$\frac{(1/a - \cot a)^2}{(1/b - \cot b)^4}\delta_0 \le \delta_1.$$

Érdekes lenne általában vizsgálni a két vagy több fázistolás közötti lineáris egyenlőtlenségeket (például δ_n és δ_k arányát). A fázistolás-sorozat sok más matematikai tulajdonsága is még felfedezésre vár.

Hivatkozások

[1] V. Alfaro and T. Regge: *Potential Scattering*, North-Holland, Amsterdam, (1965).

[2] B. Apagyi and M. Horváth: *Solution of the inverse scattering problem at fixed energy for potentials being zero beyond a fixed radius*, Modern Physics Letters B **22** (2008), No. **23**, 2137–2149.

[3] K. Chadan and P. C. Sabatier: *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*, Springer (1989).

[4] D. Colton and R. Kress: *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*, Springer (1998).

[5] L. D. Faddeev and O. A. Yakubovskii: *Lectures on Quantum Mechanics for Mathematics Students*, American Mathematical Society (2009).

[6] T. Ho and H. Rabitz: *Reconstruction of intermolecular potentials at fixed energy: Functional sensitivity analysis approach*, J. Chem. Phys. **89** (1988), No. **9**, 5614–5623.

[7] M. Horváth: *Inequalities between the fixed-energy phase shifts*, Int. J. Computing Science and Mathematics **3** (2010), No. **1-2**, 132–141.

[8] M. Horváth: *Inverse scattering with fixed energy and an inverse eigenvalue problem on the half-line*, Trans. Amer. Math. Soc. **358** (2006), No. **11**, 5161–5177.

[9] M. Horváth: *Notes on the distribution of phase shifts*, Modern Physics Letters B **22** (2008), No. **23**, 2163–2175.

[10] M. Horváth: *Partial identification of the potential from phase shifts*, J. Math. Anal. Appl. **380** (2011), No.**2**, 726–735.

[11] M. Horváth and M. Kiss: *On the stability of inverse scattering with fixed energy*, Inverse Problems **25** (2009), 015011.

[12] M. Horváth and O. Sáfár: *Inequalities between fixed-energy phase shifts II.*, (manuscript).

[13] M. Horváth, B. Apagyi and T. Pálmai: *Simplified solutions of the Cox-Thompson inverse scattering method at fixed energy*, J. Phys. A **41** (2008), 235305.

[14] V. Isakov: *Inverse Problems for Partial Differential Equations*, Springer (1998).

[15] A. Kirsch: *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*, Springer, Berlin Heidelberg New York (1996).

[16] P. Lax and R. Phillips: *Scattering Theory*, Academic Press (1967).

[17] J. Loeffel: *On an inverse problem in quantum scattering theory*, Ann. Inst. H. Poincaré **8** (1968), 339–447.

[18] R. G. Newton: *Scattering Theory of Waves and Particles*, Dover (2002).

[19] L. Päivärinta, K. Chadan, D. Colton and W. Rundell: *An Introduction to Inverse Scattering and Inverse Spectral Problems*, SIAM (1997).

[20] A. G. Ramm: *An inverse scattering problem with part of the fixed-energy phase shifts*, Comm. Math. Phys. **207** (1999), 231–247.

[21] A. G. Ramm: *Formula for the radius of the support of the potential in terms of scattering data*, J. Phys. A **31** (1998), 39–44.

[22] A. G. Ramm: *Inverse Problems*, Springer (2005).

[23] M. Reed and B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics III. Scattering Theory*, Academic Press (1979).

[24] T. Regge: *Introducion to complex orbital momenta*, Nuovo Cimento **14** (1959), No. **5**, 951–976.

[25] G. Teschl: *Mathematical Methods in Quantum Mechanics, With Applications to Schrödinger Operators*, Providence, Rhode Island (2014).

[26] D. Yafaev: *Mathematical Scattering Theory: General Theory*, American Mathematical Society (1992).

[27] D. Yafaev: *Scattering Theory: Some Old and New Problems*, Springer (2000).

(Beérkezett: 2017. február 18.)

Horváth Miklós 1960-ban született Budapesten. A Fazekas Mihály Gimnáziumban érettségizett 1978-ban. 1979-től 1984-ig az ELTE matematikus szakára járt, 1984-ben diplomázott.

Munkahelyei: 1984–1987: TMB ösztöndíjas, 1987–1988: tudományos segédmunkatárs az ELTE TTK Analízis Tanszéken, 1988–1996: tanársegéd, majd docens a BME Villamosmérnökkari Matematika Tanszéken, 1996–2008: docens, 2008-tól egyetemi tanár a BME TTK Analízis Tanszéken. 2007-től az Analízis Tanszék vezetője, 2013-tól a Matematika Intézet igazgatója.

A matematikai tudomány kandidátusa címet 1991-ben szerezte meg. A BME-n habilitált 2001-ben. 2008-ban kapta meg a matematikai tudomány doktora fokozatot. Kutatási területe a lineáris differenciálegyenletek, elsősorban a Sturm-Liouville-operátorok spektrálelmélete, az inverz sajátérték-feladatok és az inverz szórási feladatok.

Egy könyv társszerkesztője, 53 folyóiratcikk szerzője. Publikációira az MTMT szerint 280 független hivatkozást kapott.

HORVÁTH MIKLÓS
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Matematika Intézet, Analízis Tanszék
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3-9.
horvath@math.bme.hu

SCATTERING THEORY:
BASIC MATHEMATICAL IDEAS AND SOME RECENT PROBLEMS

Miklós Horváth

In this paper we present some basic mathematical ideas of scattering theory; emphasis is on the light presentation rather than on mathematical rigor. The quantum scattering with fixed energy and spherically symmetrical potential is discussed in more detail. Some recent results and open problems are also formulated.