§ 125. Условие унитарности для рассеяния

Амплитуда рассеяния в произвольном (не обязательно центральном) поле удовлетворяет определенным соотношениям, являющимся следствием некоторых общих физических требований. Асимптотический вид волновой функции на больших расстояниях при упругом рассеянии в произвольном поле

$$\psi \approx e^{ikr\mathbf{n}\mathbf{n}'} + \frac{1}{r} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{ikr}. \qquad (125,1)$$

Эта форма записи отличается от (123,3) в том отношении, что амплитуда рассеяния зависит здесь от направлений двух единичных векторов — вдоль направления падения частиц ($\mathbf{n}$) и вдоль направления рассеяния ($\mathbf{n}'$), а не только от угла между ними.

Любая линейная комбинация функций вида (125,1) с различными направлениями падения $\mathbf{n}$ тоже представляет некоторый возможный процесс рассеяния. Умножив функции (125,1) на произвольные коэффициенты $F(\mathbf{n})$ и проинтегрировав по всем направлениям $\mathbf{n}$ (элемент телесного угла do), напишем такую линейную комбинацию в виде интеграла

$$\int F(\mathbf{n}) e^{ikr\mathbf{n}\mathbf{n}'} do + \frac{e^{ikr}}{r} \int F(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') do. \qquad (125,2)$$

Поскольку расстояние r сколь угодно велико, множитель $\exp(ikr\mathbf{n}\mathbf{n}')$ в первом интеграле является быстро осциллирующей функцией направления переменного вектора $\mathbf{n}$. Значение интеграла определяется поэтому в основном областями вблизи тех значений $\mathbf{n}$, при которых показатель экспоненты имеет экстремум ($\mathbf{n} = \pm\mathbf{n}'$). В каждой из областей множитель $F(\mathbf{n}) \approx F(\pm\mathbf{n}')$, можно вынести за знак интеграла, после чего интегрирование дает [1])

$$2\pi i F(-\mathbf{n}') \frac{e^{-ikr}}{kr} - 2\pi i F(\mathbf{n}') \frac{e^{ikr}}{kr} + \frac{e^{ikr}}{r} \int f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') F(\mathbf{n}) do.$$

Перепишем это выражение в компактном операторном виде, опустив общий множитель $2\pi i/k$:

$$\frac{e^{-ikr}}{r} F(-\mathbf{n}') - \frac{e^{ikr}}{r} \hat{S} F(\mathbf{n}'), \qquad (125,3)$$

где

$$\hat{S} = 1 + 2ik\hat{f}, \qquad (125,4)$$

[1]) Для вычисления интеграла смещаем путь интегрирования по переменной $\mu = \cos\theta$ (θ — угол между $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$) в плоскости комплексного μ так, чтобы он выгибался в сторону верхней полуплоскости, оставаясь закрепленным на своих концах $\mu = \pm 1$. Тогда при удалении от каждого из этих концов функция $e^{ikr\mu}$ быстро затухает.

а $\hat{f}$ — интегральный оператор

$$\hat{f}F(\mathbf{n}') = \frac{1}{4\pi}\int f(\mathbf{n},\ \mathbf{n}')F(\mathbf{n})\,do. \tag{125,5}$$

Оператор $\hat{S}$ называют *оператором* (или *матрицей*) *рассеяния*, или просто *S-матрицей*; он был впервые введен *В. Гейзенбергом* (1943).

Первый член в (125,3) представляет собой сходящуюся к центру, а второй — расходящуюся от центра волну. Сохранение числа частиц при упругом рассеянии выражается равенством полных потоков частиц в сходящейся и расходящейся волнах. Другими словами, эти две волны должны иметь одинаковую нормировку. Для этого оператор рассеяния должен быть унитарным (§ 12), т. е. должно быть

$$\hat{S}\hat{S}^{+} = 1, \tag{125,6}$$

или, подставив (125,4) и произведя перемножение:

$$\hat{f} - \hat{f}^{+} = 2ik\hat{f}\hat{f}^{+}. \tag{125,7}$$

Наконец, учитывая определение (125,5), перепишем окончательно *условие унитарности* для рассеяния в виде

$$f(\mathbf{n},\ \mathbf{n}') - f^{*}(\mathbf{n}',\ \mathbf{n}) = \frac{ik}{2\pi}\int f(\mathbf{n},\ \mathbf{n}'')f^{*}(\mathbf{n}',\ \mathbf{n}'')\,do''. \tag{125,8}$$

При $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$ интеграл в правой части равенства есть не что иное, как полное сечение рассеяния

$$\sigma = \int |f(\mathbf{n},\ \mathbf{n}'')|^{2}\,do''.$$

Разность же в левой стороне равенства сводится в этом случае к мнимой части амплитуды $f(\mathbf{n},\ \mathbf{n})$. Таким образом, получаем следующее общее соотношение между полным сечением упругого рассеяния и мнимой частью амплитуды рассеяния на нулевой угол:

$$\operatorname{Im} f(\mathbf{n},\ \mathbf{n}) = \frac{k}{4\pi}\sigma \tag{125,9}$$

(так называемая *оптическая теорема* для рассеяния).

Еще одно общее свойство амплитуды рассеяния может быть получено, исходя из требования симметрии по отношению к обращению времени. В квантовой механике эта симметрия выражается в том, что если функция описывает какое-либо возможное состояние, то и комплексно сопряженная функция ψ^{*} отвечает некоторому возможному состоянию (§ 18). Поэтому волновая функция

$$\frac{e^{ikr}}{r}F^{*}(-\mathbf{n}') - \frac{e^{-ikr}}{r}\hat{S}^{*}F^{*}(\mathbf{n}'),$$

комплексно сопряженная функции (125,3), тоже описывает некоторый возможный процесс рассеяния. Введем новую произвольную функцию, обозначив $-\hat{S}^* F^*(\mathbf{n}') = \Phi(-\mathbf{n}')$. Учитывая унитарность оператора $\hat{S}$, имеем тогда

$$F^*(\mathbf{n}') = -\hat{S}^{*-1}\Phi(-\mathbf{n}') = -\tilde{\hat{S}}\Phi(-\mathbf{n}');$$

введя оператор $\hat{P}$ инверсии координат, меняющий знак векторов $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$, напишем

$$F^*(-\mathbf{n}') = \hat{P}F^*(\mathbf{n}') = -\hat{P}\tilde{\hat{S}}\hat{P}\Phi(\mathbf{n}').$$

Таким образом, получаем обращенную по времени волновую функцию в виде

$$\frac{e^{-ikr}}{r}\Phi(-\mathbf{n}') - \frac{e^{ikr}}{r}\hat{P}\tilde{\hat{S}}\hat{P}\Phi(\mathbf{n}').$$

Она должна по существу совпадать с исходной волновой функцией (125,3). Сравнение показывает, что для этого должно выполняться условие

$$\hat{P}\tilde{\hat{S}}\hat{P} = \hat{S}, \tag{125,10}$$

тогда обе функции отличаются лишь обозначением произвольной функции.

Соответствующее соотношение для амплитуды рассеяния получим, переходя от операторного равенства (125,10) к матричному. Транспонирование меняет местами начальный и конечный векторы $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$, а инверсия меняет их знаки. Поэтому имеем

$$S(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = S(-\mathbf{n}', -\mathbf{n}), \tag{125,11}$$

или, что то же:

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = f(-\mathbf{n}', -\mathbf{n}). \tag{125,12}$$

Это соотношение (так называемая *теорема взаимности*) выражает собой естественный результат: совпадение амплитуд двух процессов рассеяния, являющихся обращенными по времени друг по отношению к другу. Обращение времени переставляет начальное и конечное состояния и меняет направления движения частиц в них на обратные.

Для рассеяния в центральном поле полученные общие соотношения упрощаются. В этом случае амплитуда $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ зависит только от угла θ между $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$. Поэтому равенство (125,12) превращается в тождество. Условие же унитарности (125,8) принимает вид

$$\operatorname{Im} f(\theta) = \frac{k}{4\pi}\int f(\gamma) f^*(\gamma')\, do'', \tag{125,13}$$

где γ, γ' — углы между $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$ и некоторым направлением $\mathbf{n}''$ в пространстве. Если представить $f(\theta)$ в виде разложения (123,14), то с помощью теоремы сложения для сферических функций (с, 10) из (125,13) получим следующее соотношение для парциальных амплитуд:

$$\operatorname{Im} f_l = k|f_l|^2. \tag{125,14}$$

Эта формула может быть получена и непосредственно из выражения (123,15), согласно которому $|2ikf_l + 1|^2 = 1$. Оптическую теорему (125,9) в случае рассеяния в центральном поле тоже легко получить непосредственно из формул (123,11)—(123,12).

Переписав (125,14) в виде $\operatorname{Im}(1/f_l) = -k$, мы видим, что амплитуда f_l должна иметь вид

$$f_l = \frac{1}{g_l - ik}, \tag{125,15}$$

где $g_l = g_l(k)$ — вещественная величина; она связана с фазой δ_l соотношением

$$g_l = k \operatorname{ctg} \delta_l. \tag{125,16}$$

В дальнейшем мы неоднократно будем пользоваться таким представлением амплитуды.

Проследим — для рассеяния в центральном поле — за связью между введенным выше понятием оператора рассеяния и величинами, фигурирующими в изложенной в § 123 теории.

Поскольку орбитальный момент в центральном поле сохраняется, оператор рассеяния коммутативен с оператором момента. Другими словами, S-матрица диагональна в l-представлении. При этом в силу унитарности оператора $\hat{S}$ его собственные значения должны быть по модулю равны единице, т. е. имеют вид $\exp(2i\delta_l)$ с вещественными величинами δ_l. Легко видеть, что эти величины совпадают с фазовыми сдвигами волновых функций, так что собственные значения S-матрицы совпадают с введенными в § 123 величинами S_l (123,10); собственные же значения оператора $\hat{f} = (\hat{S} - 1)/2ik$ соответственно совпадают с парциальными амплитудами (123,15). Действительно, если в качестве функции $F(\mathbf{n})$ выбрать $P_l(\cos\theta)$ (при этом $F(-\mathbf{n}) = P_l(-\cos\theta) = (-1)^l \times P_l(\cos\theta)$), то волновая функция (125,3) должна совпасть с решением уравнения Шредингера, изображаемым отдельным членом суммы в (123,9); это и значит, что

$$\hat{S}P_l(\cos\theta) = S_l P_l(\cos\theta).$$

Для плоской волны, падающей вдоль оси z, функция $F(\mathbf{n})$ в (125,3) есть δ-функция $F = 4\delta(1 - \cos\theta)$, где θ — угол между $\mathbf{n}$ и осью z, δ-функция определена здесь, как указано в примечании на стр. 592, а коэффициент перед ней выбран так, чтобы при подстановке в правую сторону определения (125,5) получалось просто $f(\theta)$ (где теперь θ — угол между $\mathbf{n}'$ и осью z). Представив δ-функцию в виде (124,3)

$$F = 4\delta(1-\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta) \qquad (125,17)$$

и применив к ней оператор $\hat{f}$, мы получим, как и следовало, амплитуду рассеяния в виде (123,14).

Наконец, сделаем еще следующее замечание. С математической точки зрения, условие унитарности (125,8) показывает, что не всякая наперед заданная функция $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ могла бы быть амплитудой рассеяния в каком-либо поле. В частности, не всякая функция $f(\theta)$ могла бы быть амплитудой рассеяния в каком-либо центральном поле. В силу (125,13) должно выполняться определенное соотношение между ее вещественной и мнимой частями. Если написать $f(\theta) = |f|e^{i\alpha}$, то при заданном для всех углов модуле $|f|$ соотношение (125,13) даст интегральное уравнение, из которого в принципе можно определить неизвестную фазу $\alpha(\theta)$. Другими словами, по известному для всех углов сечению рассеяния (квадрату $|f|^2$) можно в принципе восстановить и амплитуду. Это восстановление, однако, не вполне однозначно и определяет амплитуду лишь с точностью до замены

$$f(\theta) \to -f^*(\theta), \qquad (125,18)$$

оставляющей инвариантным уравнение (125,13) и, конечно, не меняющей сечения $|f|^2$ (преобразование (125,18) эквивалентно одновременному изменению знака всех фаз δ_l в (123,11)). Эта неоднозначность, однако, устраняется, если амплитуда рассеяния рассматривается не только в зависимости от угла, но и от энергии. Мы увидим ниже (§ 128, 129), что аналитические свойства амплитуды как функции энергии не инвариантны относительно преобразования (125,18).

§ 126. Формула Борна

Сечение рассеяния может быть вычислено в общем виде в очень важном случае, когда рассеивающее поле может рассматриваться как возмущение[1]). В § 45 было показано, что это возможно при выполнении хотя бы одного из двух условий:

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \qquad (126,1)$$

[1]) В развитой в § 123 общей теории это приближение соответствует случаю, когда все фазы δ_l малы; сверх того, необходимо, чтобы эти фазы могли быть вычислены из уравнения Шредингера, в котором потенциальная энергия рассматривается как возмущение (см. задачу 4).