§ 136. Система волновых функций непрерывного спектра

При изучении движения в центрально-симметричном поле в гл. V рассматривались стационарные состояния, в которых частица обладает, наряду с определенными значениями энергии, также и определенными значениями орбитального момента l и его проекции m. Волновые функции этих состояний дискретного (ψ_{nlm}) и непрерывного (ψ_{klm}, энергия $\hbar^2k^2/2m$) спектров образуют вместе полную систему, по которой может быть разложена волновая функция произвольного состояния. Такая система, однако, не адекватна постановке задач в теории рассеяния. Здесь удобна другая система, в которой волновые функции непрерывного спектра характеризуются определенным асимптотическим поведением: на бесконечности имеется плоская волна $\exp(i\mathbf{kr})$ и наряду с ней расходящаяся сферическая волна; в этих состояниях частица имеет определенную энергию, но не имеет определенных момента и его проекции.

Согласно (123,6), (123,7) такие волновые функции (мы обозначим их здесь как $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$) даются формулой

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1)\, e^{i\delta_l} R_{kl}(r)\, P_l\left(\frac{\mathbf{kr}}{kr}\right). \tag{136,1}$$

Аргумент полиномов Лежандра написан здесь в виде $\cos\theta = \mathbf{kr}/kr$, благодаря чему это выражение уже не связано с каким-либо определенным выбором осей координат (как это было в (123,6), где ось z совпадает с направлением распространения плоской волны). Давая вектору $\mathbf{k}$ все возможные значения, мы получим набор волновых функций, которые, как сейчас будет показано, взаимно ортогональны и нормированы обычным для непрерывного спектра правилом

$$\int \psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\, dV = (2\pi)^3\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}). \tag{136,2}$$

Для доказательства[1]) замечаем, что произведение $\psi_{\mathbf{k}'}^{(+)*}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ выражается двойной суммой по l и l' членов, содержащих произведения

$$P_l\left(\frac{\mathbf{kr}}{kr}\right) P_{l'}\left(\frac{\mathbf{k'r}}{k'r}\right).$$

[1]) Специального доказательства требует по существу лишь взаимная ортогональность функций $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$. Что касается их нормировки, то она могла бы быть установлена непосредственно по асимптотическому виду функций (ср. § 21). В этом смысле выполнение (136,2) очевидно уже из того, что при $r\to\infty$ единственный не убывающий член в этих функциях $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \approx e^{i\mathbf{kr}}$.

Интегрирование по направлениям $\mathbf{r}$ осуществляется формулой

$$\int P_l\left(\frac{\mathbf{kr}}{kr}\right) P_{l'}\left(\frac{\mathbf{k'r}}{k'r}\right) do = \delta_{ll'} \frac{4\pi}{2l+1} P_l\left(\frac{\mathbf{kk'}}{kk'}\right) \qquad (136,3)$$

(ср. формулу (с, 12) математических дополнений), после чего остается

$$\int \psi_{\mathbf{k'}}^{(+)*} \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} dV =$$

$$= \frac{\pi}{kk'} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\left[i\delta_l(k) - i\delta_l(k')\right] P_l(\cos\gamma) \int_0^{\infty} R_{k'l} R_{kl} r^2\, dr,$$

где γ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k'}$. Но радиальные функции R_{kl} ортогональны и нормированы согласно

$$\int_0^{\infty} R_{k'l} R_{kl} r^2\, dr = 2\pi\delta(k'-k).$$

Поэтому в коэффициентах перед интегралами можно положить $k = k'$; воспользовавшись также формулой (124,3), имеем

$$\int \psi_{\mathbf{k'}}^{(+)*} \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} dV = \frac{2\pi^2}{k^2} \delta(k'-k) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\gamma) =$$

$$= \frac{8\pi^2}{k^2} \delta(k'-k)\, \delta(1-\cos\gamma).$$

Стоящее справа выражение равно нулю при всех $\mathbf{k} \neq \mathbf{k'}$, а при умножении на $2\pi k^2 \sin\gamma\, d\gamma\, dk/(2\pi)^3$ и интегрировании по всему $\mathbf{k}$-пространству дает 1, что и доказывает формулу (136,2).

Наряду с системой функций $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$, можно ввести также систему, соответствующую состояниям, в которых на бесконечности имеется плоская волна и вместе с ней — сходящаяся сферическая. Эти функции, которые обозначим через $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$, получаются из функций $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ согласно

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)} = \psi_{-\mathbf{k}}^{(+)*}. \qquad (136,4)$$

Действительно, комплексное сопряжение превращает расходящуюся волну (e^{ikr}/r) в сходящуюся (e^{-ikr}/r), а плоская волна принимает вид $e^{-i\mathbf{kr}}$. Для того чтобы сохранить прежнее определение $\mathbf{k}$ (плоская волна $e^{i\mathbf{kr}}$), надо еще заменить $\mathbf{k}$ на $-\mathbf{k}$, что и сделано в (136,4). Заметив, что $P_l(-\cos\theta) = (-1)^l P_l(\cos\theta)$, получим из (136,1)

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)} = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) e^{-i\delta_l} R_{kl}(r) P_l\left(\frac{\mathbf{kr}}{kr}\right). \qquad (136,5)$$

Очень важен случай кулонова поля. Здесь функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ (и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$) могут быть написаны в замкнутом виде, непосредственно по формуле (135,7). Параболические координаты выражаем посредством

$$\frac{k}{2}(\xi-\eta)=kz=\mathbf{kr},\quad k\eta=k(r-z)=kr-\mathbf{kr}.$$

Таким образом, получаем для кулонова поля отталкивания [1])

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}=e^{-\pi/2k}\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)e^{i\mathbf{kr}}F\left(-\frac{i}{k},\ 1,\ i(kr-\mathbf{kr})\right),\tag{136,6}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}=e^{-\pi/2k}\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)e^{i\mathbf{kr}}F\left(\frac{i}{k},\ 1,\ -i(kr+\mathbf{kr})\right).\tag{136,7}$$

Волновые функции для кулонова поля притяжения получаются отсюда одновременной заменой знака у k и r:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}=e^{\pi/2k}\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)e^{i\mathbf{kr}}F\left(\frac{i}{k},\ i(kr-\mathbf{kr})\right),\tag{136,8}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}=e^{\pi/2k}\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)e^{i\mathbf{kr}}F\left(-\frac{i}{k},\ 1,\ -i(kr+\mathbf{kr})\right).\tag{136,9}$$

Характеристикой воздействия кулонова поля на движение частицы вблизи начала координат может служить отношение квадрата модуля $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ или $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ в точке $r=0$ к квадрату модуля волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}=e^{i\mathbf{kr}}$ свободного движения. С помощью формулы

$$\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)=\frac{i}{k}\Gamma\left(\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)=\frac{\pi}{k\,\mathrm{sh}\,\frac{\pi}{k}}$$

легко находим для поля отталкивания

$$\frac{|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(0)|^2}{|\psi_{\mathbf{k}}|^2}=\frac{|\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(0)|^2}{|\psi_{\mathbf{k}}|^2}=\frac{2\pi}{k\left(e^{2\pi/k}-1\right)}\tag{136,10}$$

и для поля притяжения

$$\frac{|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(0)|^2}{|\psi_{\mathbf{k}}|^2}=\frac{|\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(0)|^2}{|\psi_{\mathbf{k}}|^2}=\frac{2\pi}{k\left(1-e^{-2\pi/k}\right)}.\tag{136,11}$$

Функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ играют существенную роль в задачах, связанных с применениями теории возмущений в непрерывном спектре. Предположим, что в результате некоторого возмущения $\hat{V}$ частица совершает переход между состояниями непрерывного спектра. Вероятность перехода определяется матричным элементом

$$\int\psi_f^*\hat{V}\psi_i\,dV.\tag{136,12}$$

---

[1]) Пользуемся кулоновыми единицами.

Возникает вопрос: какие именно решения волнового уравнения должны быть взяты в качестве начальной (ψ_i) и конечной (ψ_f) волновых функций для того, чтобы получить амплитуду перехода частицы из состояния с импульсом $\hbar\mathbf{k}$ в состояние с импульсом $\hbar\mathbf{k}'$ на бесконечности[1]). Покажем, что для этого надо выбрать

$$\psi_i = \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}, \quad \psi_f = \psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} \tag{136,13}$$

(*A. Sommerfeld*, 1931).

Это становится ясным, если рассмотреть, как решался бы поставленный вопрос методом теории возмущений, примененной не только по отношению к возмущению $\widehat{V}$, но и по отношению к полю $U(r)$, в котором движется частица. В нулевом (по U) приближении матричный элемент (136,12) имеет вид

$$V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\widehat{V}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\,dV.$$

В следующих (по U) приближениях этот интеграл заменяется рядом, каждый из членов которого выражается интегралом вида

$$\int \frac{V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}_1}U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}\ldots U_{\mathbf{k}_n\mathbf{k}}}{(E_{\mathbf{k}}-E_{\mathbf{k}_1}+i0)\ldots(E_{\mathbf{k}}-E_{\mathbf{k}_n}+i0)}\,d^3k_1\ldots d^3k_n$$

(ср. § 43, 130); в числителях стоят (расположенные в различных последовательностях) матричные элементы по отношению к невозмущенным плоским волнам, а все полюсы обходятся при интегрированиях по одному и тому же определенному правилу. С другой стороны, этот ряд может быть получен как матричный элемент (136,12) с волновыми функциями ψ_i и ψ_f, представленными в виде рядов теории возмущений по полю U. Тот факт, что в результате должна получиться сумма интегралов, в которых все полюсы обходятся по одинаковому правилу, означает, следовательно, что по такому же правилу обходятся полюсы в членах рядов, изображающих ψ_i и ψ_f^*. Но если решать волновое уравнение по теории возмущений с этим правилом обхода, то автоматически получится решение, содержащее в своей асимптотике расходящуюся (наряду с плоской) волну. Другими словами, волновые функции, которые в нулевом (по U) приближении имели вид

$$\psi_i = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \psi_f^* = e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}},$$

[1]) Пример такого процесса: электрон, сталкиваясь с неподвижным тяжелым ядром, испускает фотон, меняя при этом свою энергию и направление движения; возмущением $\widehat{V}$ является взаимодействие электрона с полем излучения, а кулоново поле ядра — полем U, для которого определены функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ (см. IV, § 92, 96). Другим примером является столкновение электрона с атомом, сопровождающееся ионизацией последнего (см. задачу 4 § 148).

должны быть заменены точными решениями волнового уравнения соответственно $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{-\mathbf{k}}^{(+)} = (\psi_{\mathbf{k}}^{(-)})^*$; этим и доказывается правило (136,13).

Выбор $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ в качестве конечной волновой функции относится также и к случаям перехода из состояния дискретного в состояние непрерывного спектра (вопрос же о способе выбора ψ_i в этом случае естественно, не возникает).

§ 137. Столкновения одинаковых частиц

Особого рассмотрения требует случай столкновения двух одинаковых частиц. Тождественность частиц приводит в квантовой механике к появлению своеобразного обменного взаимодействия между ними. Оно существенно сказывается и на рассеянии (*N. Mott*, 1930)[1]).

Орбитальная волновая функция системы из двух частиц должна быть симметричной или антисимметричной относительно частиц в зависимости от того, четен или нечетен суммарный спин последних (см. § 62). Поэтому описывающая рассеяние волновая функция, получающаяся путем решения обычного уравнения Шредингера, должна быть симметризована или антисимметризована по частицам. Перестановка частиц эквивалентна замене направления соединяющего их радиуса-вектора на обратное. В системе координат, в которой покоится центр инерции, это означает, что r остается неизменным, а угол θ заменяется на $\pi - \theta$ (в связи с чем $z = r\cos\theta$ переходит в $-z$). Поэтому вместо асимптотического выражения (123,3) волновой функции мы должны писать

$$\psi = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + \frac{1}{r} e^{ikr} [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)]. \qquad (137,1)$$

В силу тождественности частиц нельзя, конечно, указать, которая из них есть рассеиваемая, а которая — рассеивающая. В системе центра инерции мы имеем две одинаковые распространяющиеся навстречу друг другу падающие волны: e^{ikz} и e^{-ikz}. Расходящаяся же сферическая волна в (137,1) учитывает рассеяние обеих частиц, и вычисленный с ее помощью поток определяет вероятность того, что в данном элементе do телесного угла будет рассеяна какая-либо из частиц. Сечение рассеяния есть отношение этого потока к плотности потока в каждой из падающих плоских волн, т. е. по-прежнему определяется квадратом модуля коэффициента при e^{ikr}/r в волновой функции (137,1).

[1]) Прямое спин-орбитальное взаимодействие здесь по-прежнему не рассматривается.