в кулонову амплитуду рассеяния (135,9)

$$f_{\text{кул}}(\theta) = -\frac{1}{2a_c k^2 \sin^2(\theta/2)} \exp\left(-\frac{2i}{ka_c}\ln\sin\frac{\theta}{2} + 2i\delta_0^{\text{кул}}\right). \tag{138,15}$$

Вторую же скобку в (138,14) сохраняем только в члене с $l = 0$. Таким образом, полная амплитуда рассеяния представится в виде

$$f(\theta) = f_{\text{кул}}(\theta) + \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0} - 1)\exp(2i\delta_0^{\text{кул}}). \tag{138,16}$$

Второй член в этом выражении можно назвать амплитудой ядерного рассеяния. Следует, однако, подчеркнуть, что такое разделение условно: ввиду определения δ_0, согласно (138,11), наличие кулонова взаимодействия существенно сказывается и на этом члене, который оказывается совершенно отличным от того, что было бы при тех же короткодействующих силах для незаряженных частиц. В частности, при $ka_c \to 0$ фаза δ_0, а с нею и весь второй член в (138,16) стремятся экспоненциально (как $\exp(-2\pi/ka_c)$) к нулю, т. е. ядерное рассеяние полностью маскируется кулоновым отталкиванием.

В сечении рассеяния обе части амплитуды интерферируют друг с другом:

$$\frac{d\sigma}{do} = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2}\right)^2 \times \left[\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}} - \frac{4ka}{\sin^2\frac{\theta}{2}}\sin\delta_0\cos\left(\frac{2}{ka_c}\ln\sin\frac{\theta}{2} + \delta_0\right) + 4(ka_c)^2\sin\delta_0^2\right]. \tag{138,17}$$

Здесь предполагается, что сталкивающиеся частицы различны; для одинаковых частиц амплитуда рассеяния должна была бы быть перед возведением в квадрат предварительно симметризована (ср. § 137).

§ 139. Упругие столкновения быстрых электронов с атомами

Упругие столкновения быстрых электронов с атомами могут быть рассмотрены с помощью борновского приближения, если скорость падающего электрона велика по сравнению со скоростями атомных электронов.

Ввиду большой разницы в массах между электроном и атомом последний можно считать при столкновении неподвижным, и система координат, в которой неподвижен центр инерции, совпадает с системой, в которой неподвижен атом. Тогда $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ в формуле (126,7) обозначают импульсы электрона до и после столкновения, m — масса электрона, а угол θ совпадает с углом ϑ отклонения электрона. Потенциальная же энергия $U(r)$ в формуле (126,7) требует должного определения.

В § 126 мы вычисляли матричный элемент $U_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ энергии взаимодействия по отношению к волновым функциям свободной частицы до и после столкновения. При столкновении с атомом необходимо учитывать также и волновые функции, описывающие внутреннее состояние атома. При упругом рассеянии состояние атома не меняется. Поэтому $U_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ должно быть определено как матричный элемент по отношению к волновым функциям $\psi_{\mathbf{p}}$ и $\psi_{\mathbf{p}'}$ электрона, диагональный по отношению к волновой функции атома. Другими словами, U в формуле (126,7) надо понимать как потенциальную энергию взаимодействия электрона с атомом, усредненную по волновой функции последнего. Она равна $e\varphi(r)$, где $\varphi(r)$ — потенциал поля, создаваемый в точке r средним распределением зарядов в атоме.

Обозначив плотность распределения зарядов в атоме посредством $\rho(r)$, имеем для потенциала φ уравнение Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho(r).$$

Искомый матричный элемент $U_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}$ есть в основном компонента Фурье от U (т. е. от φ), соответствующая волновому вектору $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Применив уравнение Пуассона к каждой из компонент Фурье в отдельности, имеем

$$\Delta(\varphi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qr}}) = -q^2\varphi_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qr}} = -4\pi\rho_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qr}},$$

откуда $\varphi_{\mathbf{q}} = 4\pi\rho_{\mathbf{q}}/q^2$, т. е.

$$\int \varphi e^{-i\mathbf{qr}}\,dV = \frac{4\pi}{q^2}\int \rho e^{-i\mathbf{qr}}\,dV. \qquad (139,1)$$

Плотность зарядов $\rho(\mathbf{r})$ составляется из электронных зарядов и заряда ядра:

$$\rho = -en(r) + Ze\delta(\mathbf{r}),$$

где $en(r)$ — плотность электронного заряда в атоме. Умножив на $e^{-i\mathbf{qr}}$ и интегрируя, имеем

$$\int \rho e^{-i\mathbf{qr}}\,dV = -e\int n e^{-i\mathbf{qr}}\,dV + Ze.$$

Таким образом, получаем для интересующего нас интеграла выражение

$$\int U e^{-i\mathbf{qr}}\,dV = \frac{4\pi e^2}{q^2}[Z - F(q)], \qquad (139,2)$$

где величина $F(q)$ определяется формулой

$$F(q) = \int n e^{-i\mathbf{qr}}\,dV \qquad (139,3)$$

и называется *атомным формфактором*. Он является функцией угла рассеяния, а также скорости падающего электрона.

Наконец, подставив (139,2) в (126,7), получим окончательно следующее выражение для сечения упругого рассеяния быстрых электронов атомом [1]:

$$d\sigma = \frac{4m^2e^4}{\hbar^4 q^4}[Z - F(q)]^2 \, do, \quad q = \frac{2mv}{\hbar}\sin\frac{\vartheta}{2}. \qquad (139,4)$$

Рассмотрим предельный случай $qa_0 \ll 1$, где a_0 — порядок величины размеров атома. Малым q соответствуют малые углы рассеяния: $\vartheta \ll v_0/v$, где $v_0 \sim \hbar/ma_0$ — порядок величины скоростей атомных электронов.

Разложим $F(q)$ в ряд по степеням q. Член нулевого порядка равен $\int n\,dV$, т. е. полному числу Z электронов в атоме. Член первого порядка пропорционален $\int \mathbf{r} n(r)\,dV$, т. е. среднему значению дипольного момента атома; это значение обращается тождественно в нуль (§ 75). Поэтому надо произвести разложение до члена второго порядка, что дает

$$Z - F(q) = \frac{q^2}{6}\int nr^2\,dV;$$

подставив в (139,4), получим

$$d\sigma = \left|\frac{me^2}{3\hbar^2}\int nr^2\,dV\right|^2 do. \qquad (139,5)$$

Таким образом, в области малых углов сечение оказывается не зависящим от угла рассеяния и определяется средним квадратом расстояния атомных электронов от ядра.

В обратном предельном случае больших q ($qa_0 \gg 1$, $\vartheta \gg v_0/v$) множитель $e^{-i\mathbf{qr}}$ в подынтегральном выражении в (139,3) есть быстро осциллирующая функция, и потому весь интеграл близок к нулю. Можно, следовательно, пренебречь $F(q)$ по сравнению с Z; тогда остается

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{do}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}}, \qquad (139,6)$$

т. е. резерфордовское сечение рассеяния на ядре атома.

Вычислим также транспортное сечение

$$\sigma_{tr} = \int (1 - \cos\vartheta)\,d\sigma. \qquad (139,7)$$

[1]) Мы пренебрегаем обменными эффектами между рассеиваемым быстрым электроном и атомными электронами, т. е. не производим симметризации волновой функции системы. Законность этого пренебрежения заранее очевидна: интерференция между быстро осциллирующей волновой функцией свободной частицы и волновой функцией атомных электронов в «обменном интеграле» приведет к тому, что связанный с ним вклад в амплитуду рассеяния окажется малым.

В области углов $\vartheta \ll v_0/v$ имеем, согласно (139,5),

$$d\sigma = \text{const} \cdot \sin\vartheta\, d\vartheta \approx \text{const}\,\vartheta\, d\vartheta,$$

где const не зависит от ϑ. Поэтому в этой области подынтегральное выражение в рассматриваемом интеграле пропорционально $\vartheta^3 d\vartheta$, так что на нижнем пределе интеграл быстро сходится. В области же $1 \gg \vartheta \gg v_0/v$ имеем

$$d\sigma \approx \text{const}\,(d\vartheta/\vartheta^3),$$

подынтегральное выражение пропорционально $d\vartheta/\vartheta$, т. е. интеграл (139,7) расходится логарифмически.

Отсюда видно, что основную роль в интеграле играет именно эта область углов и можно ограничиться интегрированием только по ней. Нижний предел интегрирования должен быть взят порядка v_0/v; напишем его в виде $e^2/\gamma\hbar v$, где γ — безразмерная постоянная. В результате получим следующую формулу:

$$\sigma_{\text{tr}} = 4\pi\left(\frac{Ze^2}{mv^2}\right)^2 \ln\frac{\gamma\hbar v}{e^2}. \tag{139,8}$$

Точное вычисление постоянной γ требует рассмотрения рассеяния на углы $\vartheta > v_0/v$ и не может быть произведено в общем виде; σ_{tr} слабо зависит от значения этой постоянной, поскольку она входит под знаком логарифма, умноженная на большую величину $\hbar v/e^2$.

Для численного определения формфактора тяжелых атомов можно пользоваться распределением Томаса—Ферми плотности $n(r)$. Мы видели, что в модели Томаса—Ферми $n(r)$ имеет вид

$$n(r) = Z^2 f\left(\frac{rZ^{1/3}}{b}\right)$$

(все величины в этой и следующих формулах измеряются в атомных единицах). Легко видеть, что интеграл (139,3), вычисленный с такой функцией $n(r)$, будет содержать q лишь в определенной комбинации с Z:

$$F(q) = Z\varphi\,(bqZ^{-1/3}). \tag{139,9}$$

В табл. 11 приведены значения универсальной для всех атомов функции $\varphi(x)$ [1]).

С атомным формфактором (139,9) сечение (139,4) будет иметь вид

$$d\sigma = \frac{4Z^2}{q^4}[1 - \varphi\,(bqZ^{-1/3})]^2\, do = Z^{2/3}\Phi\left(Z^{-1/3} v \sin\frac{\vartheta}{2}\right) do, \tag{139,10}$$

[1]) Надо иметь в виду, что при малых q эта формула неприменима, в соответствии с тем, что интеграл от nr^2 фактически не может быть вычислен по методу Томаса—Ферми (см. примечание [1]) на стр. 541). Следует также помнить, что модель Томаса—Ферми не отражает индивидуальных свойств атомов, нарушающих их систематическое изменение с атомным номером.

Таблица 11

Атомный фактор по Томасу—Ферми

x	$\varphi(x)$	x	$\varphi(x)$	x	$\varphi(x)$
0	1,000	1,08	0,422	2,17	0,224
0,15	0,922	1,24	0,378	2,32	0,205
0,31	0,796	1,39	0,342	2,48	0,189
0,46	0,684	1,55	0,309	2,64	0,175
0,62	0,589	1,70	0,284	2,79	0,167
0,77	0,522	1,86	0,264	2,94	0,156
0,93	0,469	2,02	0,240		

где $\Phi(x)$ — новая универсальная функция. Интегрированием можно получить полное сечение. В интеграле основную роль играет область малых ϑ. Поэтому можно написать

$$d\sigma \approx Z^{2/3}\Phi\,(Z^{-1/3}v\vartheta/2)\,2\pi\vartheta\,d\vartheta,$$

а интегрирование по $d\vartheta$ распространить до бесконечности:

$$\sigma = 2\pi Z^{2/3}\int_0^\infty \Phi\left(Z^{-1/3}\frac{v\vartheta}{2}\right)\vartheta\,d\vartheta = \frac{8\pi}{v^2}Z^{4/3}\int_0^\infty x\Phi(x)\,dx.$$

Таким образом, σ имеет вид

$$\sigma = \text{const}\cdot\frac{Z^{4/3}}{v^2}. \tag{139,11}$$

Аналогичным образом легко убедиться в том, что постоянная γ в формуле (139,8) будет пропорциональна $Z^{-1/3}$.

Задача

Вычислить сечение упругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода в основном состоянии.

Решение. Волновая функция нормального состояния атома водорода есть $\psi = e^{-r}/\sqrt{\pi}$ (в атомных единицах), так что $n = e^{-2r}/\pi$. Интегрирование в (139,3) по углам производится как при выводе формулы (126,12) и дает

$$F = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty n(r)\sin qr\cdot dr = \left(1+\frac{q^2}{4}\right)^{-2}.$$

Подставив в (139,4), получим

$$d\sigma = \frac{4(8+q^2)^2}{(4+q^2)^4}\,do,$$

где $q = 2v\sin(\vartheta/2)$. Для вычисления полного сечения пишем

$$do = 2\pi\sin\vartheta\,d\vartheta = \frac{2\pi}{v^2}q\,dq$$

и интегрируем по dq от 0 до $2v$; поскольку, однако, v предполагается большим, а интеграл сходится, верхний предел можно заменить бесконечностью. В результате получим

$$\sigma = \frac{7\pi}{3v^2}.$$

Транспортное сечение вычисляется как интеграл

$$\sigma_{tr} = \frac{1}{2v^2}\int q^2\, d\sigma.$$

Заменив переменную интегрирования, согласно $4+q^2=u$, и заменив везде, кроме члена du/u, верхний предел бесконечностью, получим

$$\sigma_{tr} = \frac{4\pi}{v^4}\left(\ln v + \frac{1}{12}\right)$$

в соответствии с (139,8).

§ 140. Рассеяние при спин-орбитальном взаимодействии

До сих пор мы рассматривали лишь столкновения частиц, взаимодействие которых не зависит от их спинов. В этих условиях спины либо вообще не влияют на процесс рассеяния, либо оказывают косвенное влияние, связанное с обменными эффектами (§ 137).

Обратимся теперь к обобщению развитой в § 123 общей теории рассеяния на случай, когда взаимодействие частиц существенно зависит от их спинов, как это имеет место при столкновениях ядерных частиц.

Рассмотрим подробно наиболее простой случай, когда одна из сталкивающихся частиц (для определенности будем считать, что это — частица падающего пучка) имеет спин 1/2, а другая (частица-мишень) — спин 0.

При заданном (полуцелом) полном моменте системы j орбитальный момент может иметь лишь два значения $l = j \pm 1/2$, которым соответствуют состояния различной четности. Поэтому из сохранения $\mathbf{j}$ и четности в этом случае следует также и сохранение абсолютной величины орбитального момента.

Оператор $\hat{f}$ (§ 125) действует теперь не только на орбитальные, но и на спиновые переменные волновой функции системы. Он должен быть коммутативен с оператором сохраняющейся величины $\mathbf{l}^2$. Наиболее общий вид такого оператора

$$\hat{f} = \hat{a} + \hat{b}\,\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{s}}, \tag{140,1}$$

где $\hat{a}$, $\hat{b}$ — орбитальные операторы, зависящие только от $\mathbf{l}^2$.

S-матрица, а с нею и матрица оператора $\hat{f}$ диагональны по отношению к волновым функциям состояний с определенными значениями сохраняющихся величин l и j (и проекции m полного момента), причем диагональные элементы выражаются через