рассеяния осциллирует между нулем и $4\pi/k_a^2$, как это показано схематически на рис. 51. Ширина всей подпороговой области, в которой обнаруживается резонансная структура, определяется величиной энергии первого кулонова уровня [1]).

## § 148. Неупругие столкновения быстрых электронов с атомами

Неупругие столкновения быстрых электронов с атомами могут быть рассмотрены с помощью борновского приближения аналогично тому, как это было сделано в § 139 для упругих столкновений [2]). Условие применимости борновского приближения по-прежнему требует, чтобы скорость падающего электрона была велика по сравнению со скоростями атомных электронов. Что же касается потери энергии при столкновении, то она может быть любой. Если электрон теряет значительную часть своей энергии, то это приводит к ионизации атома, причем энергия передается одному из его электронов. Но мы всегда можем считать рассеянным тот из обоих электронов, который имеет после столкновения большую скорость, и, таким образом, при большой скорости падающего электрона будет велика также и скорость рассеянного.

При столкновениях электрона с атомом систему координат, в которой покоится их центр инерции, можно считать, как уже указывалось, совпадающей с системой, в которой покоится атом; ниже мы будем говорить именно об этой последней системе.

Неупругое столкновение сопровождается изменением внутреннего состояния атома. Атом может перейти из нормального состояния в возбужденное состояние дискретного или непрерывного спектра; в последнем случае это означает ионизацию атома. При выводе общих формул эти случаи можно рассматривать вместе.

Исходим (как и в § 126) из общей формулы для вероятности перехода между состояниями непрерывного спектра, применяя ее

---

[1]) Упомянем еще один интересный случай околопороговых реакций — ионизация атома электроном, энергия которого лишь немного превосходит энергию первой ионизации атома. В этих условиях процесс столкновения может рассматриваться как квазиклассический, но задача очень усложняется наличием трех заряженных частиц в конечном состоянии. Общее решение этой трудной задачи дано *Ванње* (*G. H. Wannier*, Phys. Rev. **90**, 817 (1953)). Вероятность ионизации нейтрального атома оказывается пропорциональной:

$$(E - I)^{\alpha},$$

где

$$\alpha = \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{91}{3}} - 1\right) = 1{,}13,$$

где $E - I$ — избыток энергии электрона над порогом ионизации.

[2]) Большинство результатов, излагаемых в § 148—150, было получено *Бете* (*H. A. Bethe*, 1930).

к системе, состоящей из падающего электрона и атома. Пусть $\mathbf{p}$, $\mathbf{p}'$ — импульсы падающего электрона, а $E_0$, $E_n$ — энергии атома соответственно до и после столкновения. Для вероятности перехода имеем вместо (126,9) выражение

$$dw_n = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n, \mathbf{p}' | U | 0, \mathbf{p}\rangle|^2 \delta\left(\frac{p'^2 - p^2}{2m} + E_n - E_0\right) \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (148,1)$$

где матричный элемент берется от энергии взаимодействия падающего электрона с атомом

$$U = \frac{Ze^2}{r} - \sum_{a=1}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|}$$

($\mathbf{r}$ — радиус-вектор падающего электрона, $\mathbf{r}_a$ — атомных электронов, начало координат выбрано в ядре атома; $m$ — масса электрона).

Волновые функции $\psi_{\mathbf{p}}$, $\psi_{\mathbf{p}'}$ электрона определяются прежними формулами (126,10), (126,11); тогда $dw$ есть сечение столкновения $d\sigma$. Волновые функции атома в исходном и конечном состояниях обозначим посредством $\psi_0$, $\psi_n$. Если конечное состояние атома относится к дискретному спектру, то $\psi_n$ (как и $\psi_0$) нормирована обычным образом на единицу. Если же атом переходит в состояние непрерывного спектра, то волновая функция нормируется на $\delta$-функцию от параметров $\nu$, определяющих эти состояния (этими параметрами могут быть, например, энергия атома, компоненты импульса вылетевшего из атома при ионизации электрона). Получающиеся в результате сечения определяют вероятность столкновения с переходом атома в состояния непрерывного спектра, лежащие в интервале значений параметров между $\nu$ и $\nu + d\nu$.

Интегрирование в (148,1) по абсолютной величине $p'$ дает

$$d\sigma_n = \frac{mp'}{4\pi^2\hbar^4} |\langle n\mathbf{p}' | U | 0\mathbf{p}\rangle|^2 do',$$

где $p'$ определяется из закона сохранения энергии

$$\frac{p^2 - p'^2}{2m} = E_n - E_0. \quad (148,2)$$

Подставив в матричный элемент волновые функции электрона из (126,10), (126,11), получим

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \frac{p'}{p} \left| \iint U e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_n^* \psi_0 \, d\tau \, dV \right|^2 do \quad (148,3)$$

($d\tau = dV_1 dV_2 \ldots dV_Z$ — элемент конфигурационного пространства $Z$ электронов атома, штрих у $do$ опускаем) [1]. При $n = 0$ и $p = p'$ (148,3) переходит в формулу для сечения упругого рассеяния.

В силу ортогональности функций $\psi_n$ и $\psi_0$ член в $U$, содержащий взаимодействие $Ze^2/r$ с ядром, исчезает при интегрировании по $d\tau$, и, таким образом, имеем для неупругих столкновений

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{p'}{p}\left|\sum_a \iint \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_a|} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\psi_n^*\psi_0\, d\tau\, dV\right|^2 do. \quad (148,4)$$

Интегрирование по $dV$ может быть произведено подобно тому, как это было сделано в § 139. Интеграл

$$\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_a) = \int \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_a|} dV$$

совпадает формально с компонентной Фурье потенциала, создаваемого в точке $\mathbf{r}$ зарядами, распределенными в пространстве с плотностью $\rho = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$. Поэтому по (139,1) находим

$$\varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_a) = \frac{4\pi}{q^2} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}. \quad (148,5)$$

Подставив это выражение в (148,4), приходим окончательно к следующему общему выражению для сечения неупругих столкновений:

$$d\sigma_n = \left(\frac{e^2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{4k'}{kq^4}\left|\left\langle n\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right|0\right\rangle\right|^2 do, \quad (148,6)$$

где матричный элемент берется по волновым функциям атома, а вместо импульсов введены волновые векторы $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, $\mathbf{k}' = \mathbf{p}'/\hbar$. Эта формула определяет вероятность столкновения, при котором электрон рассеивается в элемент телесного угла $do$, а атом переходит в $n$-е возбужденное состояние. Вектор $-\hbar\mathbf{q}$ представляет собой импульс, передаваемый электроном атому при столкновении.

При вычислениях бывает удобнее относить сечение не к элементу телесного угла, а к элементу $dq$ абсолютных значений вектора $\mathbf{q}$. Вектор $\mathbf{q}$ определен как $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$; для его абсолютной величины имеем

$$q^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos\vartheta. \quad (148,7)$$

[1] В таком виде это есть общая формула теории возмущений, применимая не только к столкновениям электронов с атомом, но и к любым неупругим столкновениям двух частиц, определяющая сечение рассеяния в системе координат, в которой покоится центр инерции частиц ($m$ есть тогда приведенная масса обеих частиц).

Отсюда при заданных $k$, $k'$, т. е. при заданной потере энергии электроном,

$$q\,dq = kk' \sin\vartheta\, d\vartheta = \frac{kk'}{2\pi} do. \tag{148,8}$$

Поэтому формулу (148,6) можно переписать в виде

$$d\sigma_n = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \frac{dq}{q^3} \left|\left\langle n \left| \sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} \right| 0 \right\rangle\right|^2. \tag{148,9}$$

Вектор $\mathbf{q}$ играет существенную роль в дальнейших вычислениях. Рассмотрим подробнее его связь с углом рассеяния $\vartheta$ и передаваемой при столкновении энергией $E_n - E_0$. Мы увидим ниже, что основную роль играют столкновения, вызывающие рассеяние на малые углы ($\vartheta \ll 1$) с передачей энергии, малой по сравнению с энергией $E = mv^2/2$ падающего электрона: $E_n - E_0 \ll E$. Разность $k - k'$ при этом тоже мала ($k - k' \ll k$), и потому

$$E_n - E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 - k'^2\right) \approx \frac{\hbar^2}{m} k (k - k') = \hbar v (k - k').$$

В силу малости $\vartheta$ имеем из (148,7) $q^2 \approx (k - k')^2 + (k\vartheta)^2$ и, окончательно,

$$q = \sqrt{\left(\frac{E_n - E_0}{\hbar v}\right)^2 + (k\vartheta)^2}. \tag{148,10}$$

Минимальное значение $q$:

$$q_{\min} = \frac{E_n - E_0}{\hbar v}. \tag{148,11}$$

При малых углах можно еще различать различные области в зависимости от соотношения между малыми величинами $\vartheta$ и $v_0/v$ ($v_0$ — величина порядка скорости атомных электронов). Если рассматривать передачи энергии порядка энергии $\varepsilon_0$ атомных электронов ($E_n - E_0 \sim \varepsilon_0 \sim mv_0^2$), то при $(v_0/v)^2 \ll \vartheta \ll 1$

$$q = k\vartheta = mv/\hbar\vartheta \tag{148,12}$$

(первый член под знаком корня в (148,10) может быть опущен по сравнению со вторым); следовательно, в этой области углов $q$ не зависит от величины передаваемой энергии. При $\vartheta \ll 1$ величина $q$ может быть как большой, так и малой по сравнению с $1/a_0$ (где $a_0$ — величина порядка атомных размеров). При том же предположении о величине передаваемой энергии имеем

$$qa_0 \sim 1 \text{ при } \vartheta \sim v_0/v. \tag{148,13}$$

Вернемся теперь к исследованию общей формулы (148,9) и рассмотрим случай малых $q$ ($qa_0 \ll 1$, т. е. $\vartheta \ll v_0/v$).

В этом случае можно разложить экспоненциальные множители по степеням $\mathbf{q}$: $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} \approx 1 - i\mathbf{q}\mathbf{r}_a = 1 - iqx_a$ (ось $x$ вдоль вектора $\mathbf{q}$). При подстановке этого разложения в (148,9) члены с 1 дают нуль в силу ортогональности волновых функций $\psi_0$ и $\psi_n$ и мы получим

$$d\sigma_n = 8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \frac{dq}{q} |\langle n | d_x | 0\rangle|^2 = \left(\frac{2e}{\hbar v}\right)^2 |\langle n | d_x | 0\rangle|^2 \frac{do}{\vartheta^2}, \quad (148,14)$$

где $d_x = e\sum x_a$ — компонента дипольного момента атома. Мы видим, что сечение рассеяния (при малых $q$) определяется квадратом модуля матричного элемента дипольного момента для перехода, соответствующего изменению состояния атома [1]).

Может, однако, оказаться, что матричный элемент дипольного момента для данного перехода тождественно исчезает в силу правил отбора (запрещенный переход). Тогда разложение $\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a)$ надо продолжить до следующего члена и мы получим

$$d\sigma_n = 2\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \left|\left\langle n \left| \sum_a x_a^2 \right| 0\right\rangle\right|^2 q\,dq. \quad (148,15)$$

Рассмотрим теперь противоположный предельный случай больших $q$ ($qa_0 \gg 1$). Большие $q$ означают, что атому передается импульс, большой по сравнению с собственным первоначальным импульсом атомных электронов. Физически заранее очевидно, что в этом случае можно рассматривать атомные электроны как свободные, а столкновение с атомом — как упругое столкновение падающего электрона с первоначально покоившимися атомными электронами. Это видно также и из общей формулы (148,9). При больших $\mathbf{q}$ подынтегральное выражение в матричном элементе содержит быстро осциллирующие множители $\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a)$ и интеграл не близок к нулю, только если $\psi_n$ содержит такой же множитель. Такая функция $\psi_n$ соответствует ионизированному атому с электроном, вылетевшим из него с импульсом $-\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$, определяющимся просто законом сохранения импульса, как это было бы при столкновении двух свободных электронов.

При столкновении с большой передачей импульса оба электрона (падающий и атомный) могут в результате приобрести сравнимые по величине скорости. В связи с этим становятся существенными не принятые во внимание в общей формуле (148,9) обменные эффекты, связанные с тождественностью сталкивающихся частиц. Сечение рассеяния быстрых электронов с учетом обмена определяется формулой (137,9); эта формула относится к системе коорди-

---

[1]) Физический интерес представляет обычно сечение $d\sigma_n$, просуммированное по всем направлениям момента атома в конечном состоянии и усредненное по направлениям момента в начальном состоянии. После такого суммирования и усреднения квадрат $|\langle n | d_x | 0 \rangle|^2$ уже не зависит от направления оси $x$.

нат, в которой один из электронов до столкновения покоился. Для быстрых электронов косинус в последнем члене в (137,9) можно заменить единицей. Умножив также на число $Z$ электронов в атоме, получим сечение столкновения электрона с атомом в виде

$$d\sigma = 4Z\left(\frac{e^2}{mv^2}\right)^2\left(\frac{1}{\sin^4\vartheta}+\frac{1}{\cos^4\vartheta}-\frac{1}{\sin^2\vartheta\cos^2\vartheta}\right)\cos\vartheta\, do. \qquad (148,16)$$

В этой формуле удобно выразить угол рассеяния через энергию, приобретаемую электронами после столкновения. Как известно, при столкновении частицы с энергией $E = mv^2/2$ с покоящейся частицей той же массы энергия частиц после столкновения равна $\varepsilon = E\sin^2\vartheta$, $E-\varepsilon = E\cos^2\vartheta$. Для того чтобы получить сечение, отнесенное к интервалу $d\varepsilon$, выражаем $do$ через $d\varepsilon$ согласно соотношению $\cos\vartheta\, do = 2\pi\cos\vartheta\sin\vartheta\, d\vartheta = (\pi/E)\, d\varepsilon$. Подстановка в (148,16) приводит к окончательной формуле

$$d\sigma_\varepsilon = \pi Z e^4\left[\frac{1}{\varepsilon^2}+\frac{1}{(E-\varepsilon)^2}-\frac{1}{\varepsilon(E-\varepsilon)}\right]\frac{d\varepsilon}{E}. \qquad (148,17)$$

Если одна из энергий $\varepsilon$ или $E-\varepsilon$ мала по сравнению с другой, то из трех членов в этой формуле существен лишь один (первый или второй). Это соответствует тому, что при большой разнице в энергиях обоих электронов обменный эффект несуществен и мы должны вернуться к обычной формуле Резерфорда [1]).

Интегрирование дифференциального сечения по всем углам (или, что то же, по $dq$) дает полное сечение $\sigma_n$ столкновения с возбуждением данного состояния атома. Зависимость $\sigma_n$ от скорости падающего электрона существенно связана с наличием или отсутствием матричного элемента дипольного момента атома для соответствующего перехода. Предположим сначала, что этот элемент отличен от нуля. Тогда при малых $q$ сечение $d\sigma_n$ определяется формулой (148,14) и мы видим, что с уменьшением $q$ интеграл по $dq$ логарифмически расходится. В области же больших $q$ сечение (при заданной передаче энергии $E_n - E_0$) экспоненциально убывает с увеличением $q$ в связи с уже отмечавшимся наличием в подынтегральном выражении матричного элемента в (148,9) быстро осциллирующего множителя. Таким образом, основную роль в интеграле по $dq$ играет область малых $q$, и мы можем ограничиться интегрированием от минимального значения $q_{\min}$ (148,11) до некоторого значения $\sim 1/a_0$. В результате получим

$$\sigma_n = 8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 |\langle n|d_x|0\rangle|^2 \ln\left(\beta_n\frac{v\hbar}{e^2}\right), \qquad (148,18)$$

[1]) Для столкновения позитрона с атомом обменный эффект вообще отсутствует, и формула Резерфорда $d\sigma_\varepsilon = (\pi Z e^4/E)\, d\varepsilon/\varepsilon^2$ имеет место при всех $q \gg 1/a_0$.

где $\beta_n$ — безразмерная постоянная, которая не может быть вычислена в общем виде[1]).

Если же матричный элемент дипольного момента обращается для данного перехода в нуль, то интеграл по $dq$ быстро сходится как при малых (как это видно из (148,15)), так и при больших $q$. Основной для интеграла является в этом случае область $q \sim 1/a_0$. Общая количественная формула здесь не может быть получена, и мы можем лишь заключить, что $\sigma_n$ будет обратно пропорционально квадрату скорости:

$$\sigma_n = \frac{\text{const}}{v^2}. \tag{148,19}$$

Это следует непосредственно из общей формулы (148,9), согласно которой $d\sigma_n$ при $q \sim 1/a_0$ пропорционально $v^{-2}$.

Определим сечение $d\sigma_r$ неупругого рассеяния в данный элемент телесного угла вне зависимости от того, в какое состояние переходит атом. Для этого надо просуммировать выражение (148,9) по всем $n \neq 0$, т. е. по всем состояниям атома (как дискретного, так и непрерывного спектров), за исключением нормального. Мы исключим из рассмотрения область как больших, так и совсем малых углов и будем считать, что $1 \gg \vartheta \gg (v_0/v)^2$. Тогда, согласно (148,12), $q$ не зависит от передаваемой энергии[2]).

Последнее обстоятельство позволяет легко вычислить полное сечение неупругих столкновений, т. е. сумму

$$d\sigma_r = \sum_{n\neq 0} d\sigma_n = 8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \sum_{n\neq 0}\left|\left\langle n\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right|0\right\rangle\right|^2 \frac{dq}{q^3} =$$
$$= \left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2 \sum_{n\neq 0}\left|\left\langle n\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right|0\right\rangle\right|^2 \frac{do}{\vartheta^4}. \tag{148,20}$$

Для этого замечаем, что для всякой величины $f$ имеем по правилу умножения матриц

$$\sum_n |f_{0n}|^2 = \sum_n f_{0n}(f_{0n})^* = \sum_n f_{0n}(f^+)_{n0} = (ff^+)_{00}.$$

Суммирование производится здесь по всем $n$, включая $n = 0$. Поэтому

$$\sum_{n\neq 0}|f_{0n}|^2 = \sum_n |f_{0n}|^2 - |f_{00}|^2 = (ff^+)_{00} - |f_{00}|^2. \tag{148,21}$$

---

[1]) Мы считаем, что $E_n - E_0$ порядка энергии атомных электронов $\varepsilon_0$. При больших передачах энергии ($E_n - E_0 \sim E \gg \varepsilon_0$) формулы (148,14) (148,18) все равно неприменимы, так как матричный элемент дипольного момента становится очень малым и нельзя ограничиваться первым членом разложения по $q$.

[2]) Суммирование в (148,9) происходит и по состояниям с $E_n - E_0 \gg \varepsilon_0$, для которых (148,12) не имеет места. Однако для переходов с большой передачей энергии сечение сравнительно мало, и эти члены играют малую роль в сумме. Условие $\vartheta \ll 1$ позволяет не учитывать обменных эффектов.

Применив это соотношение к $f = \sum e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}$, получим

$$d\sigma_r = \left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2 \left\{\left\langle\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right|^2\right\rangle - \left|\left\langle\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right\rangle\right|^2\right\}\frac{do}{\vartheta^4}, \qquad (148{,}22)$$

где $\langle\ldots\rangle$ означает усреднение по нормальному состоянию атома (т. е. взятие диагонального матричного элемента 00). Среднее значение $\left\langle\sum e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right\rangle$ есть, по определению, атомный фактор $F(q)$ атома в нормальном состоянии. В первом же члене в фигурных скобках можно написать

$$\left|\sum_{a=1}^{Z} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right|^2 = Z + \sum_{a\neq b} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b)}.$$

Таким образом, находим общую формулу

$$d\sigma_r = \left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2 \left\{Z - F^2(q) + \left\langle\sum_{a\neq b} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b)}\right\rangle\right\}\frac{do}{\vartheta^4}. \qquad (148{,}23)$$

Эта формула сильно упрощается при малых $q$, когда можно произвести разложение по степеням $q$ ($v_0/v \ll qa_0 \ll 1$, что соответствует углам $(v_0/v)^2 \ll \vartheta \ll v_0/v$). Вместо того чтобы производить разложение в формуле (148,23), удобнее заново произвести суммирование по $n$, воспользовавшись для $d\sigma_n$ выражением (148,14). Суммируя с помощью соотношения (148,21) с $f = d_x$ и помня, что $\langle d_x\rangle = 0$, получим

$$d\sigma_r = \left(\frac{2e}{\hbar v}\right)^2 \langle d_x^2\rangle \frac{do}{\vartheta^2}. \qquad (148{,}24)$$

Интересно сравнить это выражение с сечением (139,5) упругого рассеяния при малых углах; в то время как последнее не зависит от $\vartheta$, сечение неупругого рассеяния в элемент телесного угла $do$ растет с уменьшением $\vartheta$ как $1/\vartheta^2$.

При углах $1 \gg \vartheta \gg v_0/v$ (так что $qa_0 \gg 1$) второй и третий члены в фигурных скобках в (148,23) малы, и мы имеем просто

$$d\sigma_r = Z\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2 \frac{do}{\vartheta^4}, \qquad (148{,}25)$$

т. е. резерфордовское рассеяние на $Z$ атомных электронах (без учета обмена). Напомним, что дифференциальное сечение упругого рассеяния (139,6) пропорционально $Z^2$, а не $Z$.

Наконец, интегрируя по углам, мы получим полное сечение $\sigma_r$ неупругого рассеяния под всеми углами и со всеми возбуждениями атома. В точности таким же образом, как и при вычислении $\sigma_n$ (148,18), получим

$$\sigma_r = 8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \langle d_x^2\rangle \ln\left(\beta\frac{v\hbar}{e^2}\right). \qquad (148{,}26)$$

**Задачи**[1])

1. Определить распределение по углам (при $1 \gg \vartheta \gg v^{-2}$) неупругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода (в нормальном состоянии).

Решение. Для атома водорода третий член в фигурных скобках в (148,23) отсутствует, а атомный фактор $F(q)$ был вычислен в задаче к § 139. Подставляя его, получим

$$d\sigma_r = \frac{4}{v^4\vartheta^4}\left[1 - \left(1 + \frac{v^2\vartheta^2}{4}\right)^{-4}\right] do.$$

2. Определить дифференциальное сечение столкновений электронов с атомом водорода в нормальном состоянии, сопровождающихся возбуждением $n$-го уровня дискретного спектра ($n$ — главное квантовое число).

Решение. Вычисление матричных элементов удобно производить в параболических координатах. Выбираем ось $z$ вдоль направления вектора $\mathbf{q}$, тогда $e^{i\mathbf{qr}} = e^{iqz} = e^{iq(\xi-\eta)/2}$. Волновая функция нормального состояния имеет вид $\psi_{000} = \pi^{-1/2}e^{-(\xi+\eta)/2}$. Матричные элементы отличны от нуля только для перехода в состояния с $m = 0$. Волновыми функциями этих состояний являются функции

$$\psi_{n_1n_20} = \frac{1}{\sqrt{\pi n^2}} e^{-\frac{\xi+\eta}{2n}} F\left(-n_1, 1, \frac{\xi}{n}\right) F\left(-n_2, 1, \frac{\eta}{n}\right)$$

$n = n_1 + n_2 + 1$). Искомые матричные элементы даются интегралами

$$\langle n_1n_20 | e^{i\mathbf{qr}} | 000\rangle = \iint\limits_0^\infty e^{i\frac{q}{2}(\xi-\eta)} \psi_{000}\psi_{n_1n_20}\frac{(\xi+\eta)}{4} 2\pi\, d\xi\, d\eta.$$

Интегрирование производится с помощью формул, приведенных в § f математического дополнения. В результате вычисления получается

$$|\langle n_1n_20 | e^{i\mathbf{qr}} | 000\rangle|^2 = 2^8n^6q^2\frac{[(n-1)^2+(qn)^2]^{n-3}}{[(n+1)^2+(qn)^2]^{n+3}}[(n_1-n_2)^2+(qn)^2].$$

Все состояния с одинаковыми $n_1 + n_2 = n - 1$ обладают одинаковой энергией. Суммируя по всем возможным значениям $n_1 - n_2$ при данном $n$ и подставляя результат в (148,9), получим искомое сечение

$$d\sigma_n = \frac{2^{11}\pi}{v^2} n^7 \left[\frac{n^2-1}{3} + (qn)^2\right] \frac{[(n-1)^2+(qn)^2]^{n-3}}{[(n+1)^2+(qn)^2]^{n+3}} \frac{dq}{q}.$$

3. Определить полное сечение возбуждения первого возбужденного состояния атома водорода.

Решение. Надо проинтегрировать

$$d\sigma_2 = \frac{2^8\pi}{v^2}\frac{dq}{q(q^2+9/4)^5}$$

[1]) Во всех задачах пользуемся атомными единицами.

по всем $q$ от $q_{\min} = (E_2 - E_1)/v = 3/8v$ до $q_{\max} = 2v$, причем должны быть сохранены только члены наибольшей степени по $v$. Интегрирование производится элементарно и дает [1])

$$\sigma_2 = \frac{2^{18}\pi}{3^{10}v^2}\left(\ln 4v - \frac{25}{24}\right) = \frac{4\pi}{v^2}\cdot 0{,}555 \ln\frac{v^2}{0{,}50}.$$

**4.** Определить сечение ионизации атома водорода (в нормальном состоянии) с вылетом вторичного электрона в определенном направлении; энергия вторичного электрона мала по сравнению с энергией первичного электрона, и потому обменные эффекты несущественны (*H. Massey*, *C. Mohr*, 1933).

Решение. Волновая функция атома в начальном состоянии есть $\psi_0 = \pi^{-1/2}e^{-r}$. В конечном состоянии атом ионизирован, и вылетевший из него вторичный электрон имеет волновой вектор, который мы обозначим посредством $\varkappa$ (и энергию $\varkappa^2/2$). Это состояние описывается функцией $\psi_\varkappa^{(-)}$(136,9), в которой «выходящая» часть состоит (на бесконечности) только из распространяющейся в направлении $\varkappa$ плоской волны. Функция $\psi_\varkappa^{(-)}$ нормирована на $\delta$-функцию в $\varkappa/2\pi$-пространстве; поэтому вычисленное с ее помощью сечение будет отнесено к $d^3\varkappa/(2\pi)^3$ или к $\varkappa^2\,d\varkappa\,do_\varkappa/(2\pi)^3$, где $do_\varkappa$ — элемент телесного угла для направления вторичного электрона. Таким образом,

$$d\sigma = \frac{4k'\varkappa^2}{(2\pi)^3 kq^4}\,|\langle\varkappa|\,e^{-i\mathbf{qr}}\,|0\rangle|^2\,do\,do_\varkappa\,d\varkappa$$

($do$ — элемент телесного угла для рассеянного электрона), где

$$\langle\varkappa|\,e^{-i\mathbf{qr}}\,|0\rangle = \int \psi_\varkappa^{(-)*}e^{-i\mathbf{qr}}\psi_0\,dV = \frac{e^{-\pi/2\varkappa}\Gamma(1 - i/\varkappa)}{\pi^{1/2}}\,I,$$

$$I = \left\{-\frac{\partial}{\partial\lambda}\int \exp(-i\mathbf{qr} - i\boldsymbol{\varkappa}\mathbf{r} - \lambda r)\,F\left(\frac{i}{\varkappa},\ 1,\ i(\varkappa r + \boldsymbol{\varkappa}\mathbf{r})\right)\frac{dV}{r}\right\}_{\lambda=1}.$$

Интегрирование производим в параболических координатах с осью $z$ вдоль направления $\varkappa$ и углом $\varphi$, отсчитываемым от плоскости ($\mathbf{q}$, $\boldsymbol{\varkappa}$):

$$I = \left\{-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\exp\left\{-\frac{i}{2}q(\xi - \eta)\cos\gamma + iq\sqrt{\xi\eta}\sin\gamma\cos\varphi - \right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{\lambda}{2}(\xi + \eta) - \frac{i}{2}\varkappa(\xi - \eta)\right\}F\left(\frac{i}{\varkappa},\ 1,\ i\varkappa\xi\right)d\varphi\,d\xi\,d\eta\right\}_{\lambda=1}$$

---

[1]) Сечение может быть вычислено и для произвольного $n$. Числовым расчетом можно получить также и полное сечение неупругого рассеяния атома водорода: $\sigma_r = \frac{4\pi}{v^2}\ln\frac{v^2}{0{,}160}$. В том числе на столкновения с возбуждением состояний дискретного спектра и с ионизацией приходится соответственно

$$\sigma_{\text{возб}} = \frac{4\pi}{v^2}\cdot 0{,}715\ln\frac{v^2}{0{,}45},\qquad \sigma_{\text{ион}} = \frac{4\pi}{v^2}\cdot 0{,}285\ln\frac{v^2}{0{,}012}.$$

($\gamma$ — угол между $\varkappa$ и $\mathbf{q}$). Интегрирование по $d\varphi\, d\eta$ легко производится путем подстановки $\sqrt{\eta}\cos\varphi = u$, $\sqrt{\eta}\sin\varphi = v$, после чего получается

$$\frac{I}{2\pi} = \left\{\frac{\partial}{\partial\lambda}\int\limits_0^\infty \exp\left\{\frac{-q^2\sin^2\gamma + \lambda^2 + (\varkappa + q\cos\gamma)^2}{2\,[i\,(\varkappa + q\cos\gamma) - \lambda]}\,\xi\right\}\frac{F\,(i/\varkappa,\ 1,\ i\varkappa\xi)\,d\xi}{[i\,(\varkappa + q\cos\gamma) - \lambda]}\right\}_{\lambda=1}.$$

Стоящий здесь интеграл берется по формуле (f,3) с $\gamma = 1$, $n = 0$.

Дальнейшие вычисления длинны, но элементарны и дают в результате следующее выражение для сечения:

$$d\sigma = \frac{2^8 k'\varkappa\,[q^2 + 2q\varkappa\cos\gamma + (\varkappa^2+1)\cos^2\gamma]}{\pi k q^2\,[q^2 + 2q\varkappa\cos\gamma + 1 + \varkappa^2]^4[(q+\varkappa)^2+1]\,[(q-\varkappa)^2+1]\left(1 - e^{-2\pi/\varkappa}\right)}\times$$

$$\times\exp\left(-\frac{2}{\varkappa}\operatorname{arctg}\frac{2\varkappa}{q^2-\varkappa^2+1}\right)do\,do_\varkappa\,d\varkappa.$$

Интегрирование по всем углам испускания вторичного электрона производится элементарно и дает распределение рассеяния по направлениям при данной энергии $\varkappa^2/2$ испущенного электрона

$$d\sigma = \frac{2^{10}k'\varkappa}{kq^2}\,\frac{\left[q^2 + \frac{1}{3}(1+\varkappa^2)\right]\exp\left(-\frac{2}{\varkappa}\operatorname{arctg}\frac{2\varkappa}{q^2-\varkappa^2+1}\right)}{[(q+\varkappa)^2+1]^3\,[(q-\varkappa)^2+1]^3\left(1 - e^{-2\pi/\varkappa}\right)}\,do\,d\varkappa.$$

При $q \gg 1$ это выражение имеет острый максимум при $\varkappa \approx q$; вблизи максимума

$$d\sigma = \frac{2^5}{3\pi\varkappa^4}\,\frac{d\varkappa\,do}{[1+(q-\varkappa)^2]^3}.$$

Интегрируя по $do = 2\pi q\,dq/k^2 \approx (2\pi\varkappa/k^2)\,d\,(q-\varkappa)$, получим выражение $8\pi\,d\varkappa/k^2\varkappa^3$, совпадающее, как и следовало, с первым членом по формуле (148,17).

## § 149. Эффективное торможение

В применениях теории столкновений большое значение имеет вычисление средней потери энергии сталкивающейся частицей. Эту потерю удобно характеризовать величиной

$$d\varkappa = \sum_n (E_n - E_0)\,d\sigma_n, \tag{149,1}$$

которую мы будем называть *эффективным торможением* (дифференциальным); суммирование производится, разумеется, по состояниям как дискретного, так и непрерывного спектров, $d\varkappa$ отнесено к рассеянию в данный элемент телесного угла[1]).

Общая формула для эффективного торможения быстрых электронов имеет вид

$$d\varkappa = 8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\sum_n (E_n - E_0)\left|\left\langle n\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right|0\right\rangle\right|^2\frac{dq}{q^3} \tag{149,2}$$

[1]) Если электрон проходит через газ, рассеяние на различных атомах происходит независимо и величина $N\,d\varkappa$ ($N$ — число атомов в единице объема газа) есть энергия, теряемая электроном на единице его пути при столкновениях, отклоняющих его в данный элемент телесного угла.