§ 85. Рассеяние быстрых заряженных частиц атомами

Применим формулу Борна к вычислению эффективного сечения рассеяния быстрых заряженных частиц атомами.

Будем считать, что ядро атома с зарядом Ze находится в начале координат, заряд атомной оболочки распределен в пространстве с плотностью $n(\boldsymbol{r})$. Размерами ядра будем пренебрегать и считать его точечным.

Дифференциальное эффективное сечение рассеяния дается формулой (84,6), которая при $U = e\varphi$, где e — заряд, φ — потенциал электрического поля, действующего на рассеивающуюся частицу, приобретает вид

$$d\sigma = \frac{m^2e^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int \varphi(\boldsymbol{r}')\, e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'}\, dV'\right|^2 d\Omega. \tag{85,1}$$

Интеграл в формуле (85,1) удобно выразить через распределение плотности заряда в атоме.

Для этого заметим, что $\int \varphi(\boldsymbol{r}')\, e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'}\, dV'$ представляет собой компоненту Фурье от потенциала. Она может быть выражена через компоненту Фурье от плотности заряда аналогично формуле (24,25) ч. I, связывающей компоненту Фурье плотности тока с компонентой Фурье потенциала.

Тогда имеем

$$d\sigma = \frac{4m^2e^2}{\hbar^4K^4}\left|\int \rho(r')\, e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'}\, dV'\right|^2 d\Omega. \tag{85,2}$$

Плотность заряда в атоме можно написать в виде

$$\rho(\boldsymbol{r}) = Ze\delta(\boldsymbol{r}) - en(\boldsymbol{r}). \tag{85,3}$$

Для дифференциального сечения получаем окончательно:

$$d\sigma = \frac{4n^2e^4}{\hbar^4K^4}\left|\int Ze^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'}\delta(\boldsymbol{r}')\, dV' - \int n(\boldsymbol{r}')\, e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'}\, dV'\right|^2 d\Omega =$$

$$= \frac{4m^2e^2}{\hbar^4K^4}\,|Z - F(K)|^2\, d\Omega, \tag{85,4}$$

где

$$F(K) = \int n(\boldsymbol{r}')\, e^{i\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}'}\, dV'. \tag{85,5}$$

Величина F называется атомным формфактором. Ее значение определяется распределением плотности электронного заряда.

Подставляя в (85,5) значение вектора столкновения K согласно (84,7), перепишем дифференциальное эффективное сечение в форме

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{2mv^2}\right)^2 |Z - F(K)|^2\, \frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \tag{85,6}$$

Рассмотрим вначале частный случай формулы (85,6). Если рассеяние происходит на точечном ядре, лишенном электронной оболочки $n=0$, то, следовательно, $F=0$. Тогда получаем для дифференциального эффективного сечения:

$$d\sigma=\left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \tag{85,7}$$

Мы приходим к известной формуле Резерфорда, которая получается также в классической механике. Формула Резерфорда в данном случае получена с помощью приближенного метода Борна. Интересно, однако, отметить, что при точном решении задачи[1]) получается то же самое выражение. Так как эффективное сечение рассеяния при точном решении не содержит постоянную Планка $\hbar$, то результаты, даваемые классической и квантовой физикой, естественно, должны совпадать.

Обращение сечения в бесконечность при рассеянии на бесконечномалые углы связано с медленным изменением кулоновского потенциала. Поэтому частицы рассеиваются, как бы далеко они ни пролетали от центра рассеяния. В действительности, однако, экранирующее действие электронной оболочки обеспечивает, как мы увидим дальше, конечное значение сечения рассеяния.

Рассмотрим теперь атомный формфактор (85,5). Эффективная область интегрирования в нем имеет размер порядка размера атома a. Вне этой области $n(r)$ обращается в нуль. Поэтому при малых углах θ, при которых $Ka\ll 1$, в интеграле (85,5) можно разложить экспоненту в ряд. Тогда имеем

$$Z-F(K)=Z-Z-i\boldsymbol{K}\int n(\boldsymbol{r}')\,\boldsymbol{r}'\,dV'+\frac{1}{2}\int n(\boldsymbol{r}')\,(\boldsymbol{K}\boldsymbol{r}')^2\,dV'. \tag{85,8}$$

В формуле (85,8) два первых члена взаимно сокращаются, так как заряд электронной оболочки атома равен заряду ядра. Третий член представляет дипольный момент атома, который, как мы видели (см. § 72), равен нулю. В последнем члене, интегрируя по углам, получаем

$$Z-F=\frac{2\pi K^2}{3}\int_0^\infty n(|\boldsymbol{r}|)\,r^4\,dr.$$

Дифференциальное эффективное сечение в предельном случае $Ka\ll 1$ будет иметь вид

$$d\sigma=\left(\frac{4\pi me^2}{3\hbar^2}\right)^2\left|\int n(r)\,r^4\,dr\right|^2 d\Omega.$$

[1]) См., например, Н. Мотт и Г. Месси, Теория атомных столкновений, «Мир», 1969, стр. 57.

Таким образом, благодаря экранированию заряда электронной оболочкой дифференциальное эффективное сечение при малых углах рассеяния оказывается конечной и постоянной (не зависящей от углов) величиной. Наоборот при больших углах рассеяния, когда выполнено обратное неравенство $Ka \gg 1$, экспонента в интеграле (85,5) начинает быстро осциллировать и формфактор оказывается малой величиной. Пренебрегая им по сравнению с Z, мы приходим к (85,7). Экранирование заряда ядра не проявляется при больших углах рассеяния.

В качестве примера вычислим формфактор для атома водорода. Плотность заряда в атоме водорода в основном состоянии согласно (§ 38) равна

$$n(r) = |\psi(r)|^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}}, \qquad a = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Следовательно, формфактор определяется интегралом

$$F(K) = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-\frac{2r}{a}} e^{iKr} r^2\, dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi. \tag{85,9}$$

Направив ось z вдоль вектора $\boldsymbol{K}$, имеем

$$F(K) = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-\frac{2r}{a}} e^{iKr\cos\theta} r^2\, dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

Произведя интегрирование, находим окончательно:

$$F(K) = \frac{16}{(4 + K^2a^2)^2}.$$

При этом дифференциальное эффективное сечение для атома водорода может быть написано в виде

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{2mv^2}\right)^2 \left[1 - \frac{16}{(4 + K^2a^2)^2}\right]^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Полное сечение получается интегрированием по всем значениям угла рассеяния.

Для других атомов периодической системы элементов плотность заряда и потенциал взаимодействия рассеиваемой частицы с атомом могут быть вычислены с помощью приближенных методов Хартри или Томаса — Ферми. После этого можно производить расчет формфактора в соответствии с формулой (85,5).

§ 86. Фазовая теория рассеяния

В предыдущих параграфах мы рассматривали один из вариантов приближенной теории рассеяния.

Наряду с приближенной теорией оказывается возможным развить точную теорию рассеяния, часто именуемую фазовой