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 теорией. В точной теории рассеяния не делается никаких упрощающих предположений относительно характера взаимодействия частиц с рассеивающим центром. Поэтому эта теория применима при любых энергиях рассеивающихся частиц. Однако, как мы увидим ниже, в точной теории эффективное сечение выражается в виде бесконечных рядов, не всегда пригодных для практического использования.

Общая схема фазовой теории рассеяния не отличается от принятой в § 83. Рассмотрим движение частицы в поле рассеивающего центра. Будем считать рассеивающее поле сферически-симметричным и предположим, что вдали от центра падающая частица описывается плоской волной e^{ikz}, а рассеянная — расходящейся шаровой волной. Пусть найдено общее решение уравнения Шредингера в поле с центральной симметрией. Вдали от рассеивающего центра найденное решение следует представить в виде (83,3), т. е. в виде падающей плоской и расходящейся шаровой волны. Амплитуда последней, как мы знаем, определяет интересующее нас эффективное сечение рассеяния.

Согласно (35,31) общее решение уравнения Шредингера в поле с центральной симметрией, не зависящее от угла φ может быть представлено разложением

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_l(r) P_l(\cos\theta). \tag{86,1}$$

Каждый из членов ряда (86,1) мы будем именовать l-й парциальной волной. Вдали от центра сил асимптотический вид радиальных функций R_l дается формулами (35,25)—35,27):

$$R_l = B_l \frac{\sin\left(kr + \delta_l - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr} = B_l \frac{e^{i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr}. \tag{86,2}$$

Напомним (ср. § 36), что если потенциальная энергия $U(r)$ равна нулю во всем пространстве, то совокупность фаз δ_l также обращается в нуль. Нужное нам асимптотическое выражение для ψ при движении частицы в потенциальном поле $U(r)$ может быть записано в следующем виде:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P_l(\cos\theta) \frac{e^{i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr+\delta_l-\frac{\pi l}{2}\right)}}{2ikr}. \tag{86,3}$$

Выражение (83,3) следует теперь представить в виде (86,3). Это позволит связать коэффициенты C_l и фазы δ_l с амплитудой рассеяния $f(\theta)$. Проще всего привести (83,3) к виду (86,3), разложив выражение (83,3) в ряд по полиномам Лежандра. При этом нам понадобится разложение плоской волны e^{ikz} только на больших расстояниях, которое можно найти очень просто. Запишем плоскую волну в виде

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta)\, G_l(r), \tag{86,4}$$

где $G_l(r)$ — неизвестная функция радиуса. Умножая последнее равенство на $P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta$ и интегрируя по θ, найдем

$$\frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{+1} e^{ikrx} P_l(x)\, dx = G_l(r). \tag{86,5}$$

Мы использовали условия ортогональности и нормировки полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^{+1} P_l^2(x)\, dx = \frac{2}{2l+1}.$$

Интегрируя левую часть (86,5) по частям, имеем

$$G_l(r) = \frac{i^{-l}}{2ikr} e^{ikrx} P_l(x)\Big|_{x=-1}^{x=1} + \text{члены порядка } \frac{1}{r^2}.$$

Используя, наконец, известное свойство полиномов Лежандра $P_l(1) = 1$; $P_l(-1) = (-1)^l$, получаем для функции $G_l(r)$ на больших расстояниях:

$$G_l(r) = \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr}.$$

Таким образом, разложение плоской волны на больших расстояниях представляется в виде

$$e^{ikz} = \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr}. \tag{86,6}$$

Разложим также $f(\theta)$ в ряд по полиномам Лежандра

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} D_l P_l(\cos\theta). \tag{86,7}$$

Подставляя в (83,3) ряды (86,6) и (86,7) и приравнивая найденное выражение и асимптотическое выражение (86,3), имеем

$$\sum_l C_l \frac{P_l(\cos\theta)}{2ikr}\left(e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)} - e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)}\right) =$$

$$= \sum_l \left[\frac{i^l(2l+1)}{2ikr}\left(e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)} - e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)}\right) + D_l \frac{e^{ikr}}{r}\right] P_l(\cos\theta). \tag{86,8}$$

Для выполнения равенства (86,8) при произвольных значениях угла θ необходимо, чтобы были равны между собой коэффициенты при каждом из полиномов P_l. Приравнивая эти коэффициенты, находим

$$\frac{C_l}{2ikr}\left[e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)}-e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right)}\right]=$$
$$=\frac{i^l(2l+1)}{2ikr}\left(e^{i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)}-e^{-i\left(kr-\frac{\pi l}{2}\right)}\right)+D_l\frac{e^{ikr}}{r}. \qquad (86,9)$$

Последнее соотношение должно выполняться при произвольном значении радиуса r. Это означает, что коэффициенты у экспонент с одинаковыми показателями должны быть равны между собой. Отсюда находим следующее соотношение между коэффициентами:

$$C_l=i^l(2l+1)e^{i\delta_l},$$
$$i^l(2l+1)+2ikD_le^{\frac{i\pi l}{2}}=C_le^{i\delta_l}. \qquad (86,10)$$

Находя отсюда D_l и подставляя в разложение (86,7), получим для амплитуды рассеяния выражение

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[e^{2i\delta_l}-1\right]P_l(\cos\theta). \qquad (86,11)$$

Дифференциальное эффективное сечение будет, следовательно, равно

$$d\sigma=\frac{1}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)P_l(\cos\theta)\right|^2 d\Omega. \qquad (86,12)$$

Полное эффективное сечение найдем, интегрируя (86,12) и учитывая соотношения ортогональности для полиномов Лежандра. Простое вычисление дает:

$$\sigma=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l. \qquad (86,13)$$

Мы видим, что дифференциальное эффективное сечение и полное сечение рассеяния частицы в заданном поле сил выражаются через совокупность фаз δ_l. Отсюда следует, что для вычисления сечений рассеяния необходимо найти решение уравнения Шредингера (35,8) для частицы, движущейся в данном силовом поле. Определяя вид решения на больших расстояниях и сравнивая его с (86,2), находим δ_l.

Точное решение уравнения Шредингера позволяет найти все бесконечное множество фаз δ_l и, следовательно, значение сечения рассеяния. Точная или фазовая теория рассеяния была впервые развита Рэлеем, изучавшим рассеяние звуковых волн. Для решения задач квантовой механики метод Рэлея был впервые использован Факсеном и Хольцмарком.

Из (86,13) видно, что полное эффективное сечение можно представить в виде суммы так называемых парциальных сечений

$$\sigma = \sum_{l=0} \sigma_l, \qquad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l.$$

Каждое из парциальных сечений отвечает учету одного из членов ряда (86,2):

$$B_l P_l(\cos\theta)\,\frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)}{kr}.$$

Ясно, что он описывает состояние частицы с определенным моментом $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$. По этой причине в теории рассеяния приняты обозначения, аналогичные обозначениям атомных термов. Например, $l = 0$ отвечает S-рассеяние, которое характеризуется парциальным сечением σ_0; $l = 1$ отвечает P-рассеяние с парциальным сечением σ_1 и т. д.

Полный поток частиц в состоянии с моментом L через произвольную поверхность, окружающую рассеивающий центр, равен нулю. Его можно было бы вычислить по общей формуле (7,3). Однако это видно и без проведения расчета, на основании общей теоремы, приведенной в § 7. Там было указано, что полный поток всегда равен нулю в случае вещественной волновой функции. В нашем случае это именно так, поскольку волновая функция выражается формулой (86,2).

Равенство нулю полного потока рассеиваемых частиц имеет очевидный смысл — оно означает закон сохранения числа частиц в процессе рассеяния. Важно при этом заметить, что закон сохранения имеет место для частиц с каждым значением l порознь. К обсуждению этого обстоятельства мы вернемся еще в § 91.

Нахождение последовательности всех фаз δ_l является, как правило, весьма сложной задачей. Кроме того, практическая ценность формул, представляемых в виде рядов, невелика, если только ряды не обладают достаточно быстрой сходимостью. Мы не можем здесь останавливаться на вопросах сходимости рядов (86,12) и (86,13) и приведем лишь окончательный результат[1].

[1] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 547.

Для сходимости ряда (86,13) требуется, чтобы потенциальная энергия $U(r)$ на бесконечности убывала быстрее, чем по закону $\frac{1}{r^n}$, где $n > 2$. Далее, ряд для дифференциального эффективного сечения расходится при $\theta = 0$, если $U(r)$ на больших расстояниях имеет вид $\frac{1}{r^n}$, где $n \leqslant 3$. При $r \to 0$ $U(r)$ должна расти медленнее, чем $1/r^2$.

Практическая ценность формул (86,12) и (86,13) для эффективного сечения рассеяния тем выше, чем меньше число членов ряда играет существенную роль. Простое рассуждение показывает, что по мере увеличения энергии частицы растет число фаз δ_l, которое необходимо учитывать в рядах (86,12)—(86,13).

Действительно, пусть R — радиус области, в которой энергия взаимодействия существенно отлична от нуля. При достаточно быстром убывании $U(r)$ введение такой величины всегда возможно. Волновая функция R_l имеет первый максимум на расстоянии r, определяемом из соотношения $kr \sim l$. В последующих максимумах R_l имеет значительно меньшую величину из-за убывания множителя $\frac{1}{r}$.

При малых значениях r волновая функция также мала. Таким образом, волновая функция R_l имеет основное значение при $r \sim \frac{l}{k}$. Если $r \sim \frac{l}{k} > R$, то в области взаимодействия волновая функция мала. Но в этом случае будет мала и амплитуда рассеяния. Таким образом, испытывают эффективное рассеяние только те частицы, у которых $\frac{l}{k} \leqslant R$.

С ростом энергии частицы растет момент l эффективно рассеивающихся частиц. При малых энергиях число членов, которые следует учитывать в разложениях (86,12)—(86,13), сравнительно невелико. Поэтому фазовая теория рассеяния особенно важна для изучения рассеяния медленных частиц. Это качественное рассуждение можно заменить количественным правилом, которое мы приведем без доказательства.

Если классическая частица, имеющая импульс p и прицельное расстояние

$$\rho_l = \frac{\hbar\sqrt{l(l+1)}}{p} = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k}, \tag{86,14}$$

при движении не проникает в область, где потенциальная энергия взаимодействия частиц заметно отлична от нуля, то соответствующая моменту $\hbar^2 l(l+1)$ фаза δ_l мала[1]).

---

[1]) Вывод этого утверждения дан в книге: Н. Мотт и Г. Месси, Теория атомных столкновений, «Мир», 1969, стр. 32.

Применим это правило к исследованию рассеяния медленной частицы. Пусть рассеивающий центр создает поле, эффективное действие которого простирается на область R. Под медленными мы будем понимать частицы с волновым числом k, для которого $kR \ll 1$.

В этом случае

$$\rho_l > R, \tag{86,15}$$

для всех значений $l > 0$. Все фазы, кроме δ_0, малы. Мы видим, таким образом, что для рассеяния медленных частиц существенную роль играет только S-рассеяние.

Дифференциальное эффективное сечение при этом равно

$$d\sigma = \frac{1}{4k^2} \mid e^{2i\delta_0} - 1 \mid^2 d\Omega = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} d\Omega, \tag{86,16}$$

поскольку $P_0(0) = 1$.

Эффективное сечение S-рассеяния не зависит от угла рассеяния. Это означает, что рассеяние является сферически-симметричным. С увеличением энергии частицы начинают играть роль фазы более высокого порядка и рассеяние постепенно приобретает все более асимметричный характер.

При больших энергиях эффективное сечение становится существенно отличным от нуля только для очень малых углов θ. Это лучше всего можно увидеть с помощью формулы Борна (84,3). При больших энергиях вектор $\boldsymbol{K}$ велик, интеграл быстро осциллирует, и поэтому эффективное сечение мало́. При $\theta = 0$ вектор $\boldsymbol{K}$ равен нулю и осцилляция отсутствует, а эффективное сечение велико. Заметим, наконец, что фазовая теория рассеяния в том виде, как она изложена здесь, неприменима к рассеянию в кулоновском поле. Волновая функция в этом случае не имеет асимптотического вида (83,3). Это обстоятельство связано с очень медленным падением кулоновского потенциала как функции расстояния. Указанный случай требует особого рассмотрения [1]).

§ 87. Рассеяние сферической потенциальной ямой (понятие о резонансном рассеянии)

В качестве примера использования фазовой теории рассеяния рассмотрим рассеяние частицы в потенциальном поле, которое определим следующим образом:

$$\begin{aligned} U &= -U_0 \quad \text{при} \quad r < R, \\ U &= 0 \qquad \text{при} \quad r > R. \end{aligned} \tag{87,1}$$

[1]) Точное решение этой задачи см., например в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 597.