Нетрудно убедиться, что первые члены разложения общей формулы для S-матрицы приводят к обычной теории возмущений.

Для простоты выкладок ограничимся первым порядком теории возмущений, написав

$$S^{(1)} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \hat{H}'_{\text{int}}(t).$$

Оператор P в этом случае тождественно равен единице. Беря матричный элемент по состояниям $a \neq b$, которые являются собственными состояниями гамильтониана H_0, имеем

$$S_{ba} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, (\hat{H}'_{\text{int}})_{ba}.$$

Переходя к представлению Шредингера и пользуясь определением (49,19), получаем

$$S^{(1)}_{ba} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \langle b \,|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right) \hat{H}' \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)|\, a\rangle =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\langle b|\hat{H}'|a\rangle \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_b - E_a)\, t\right] dt = 2\pi i \hat{H}'_{ba}\delta(E_b - E_a).$$

Мы видим, что S'_{ba} совпадает с амплитудой перехода в первом приближении теории возмущений.

Аналогичные, хотя и более громоздкие вычисления, позволяют отождествить $S^{(2)}_{ba}$ с амплитудой перехода во втором порядке теории возмущений.

Несмотря на удобство записи формулы Дайсона, которой часто пользуются в промежуточных выкладках, для фактического вычисления S-матрицы приходится проводить разложение в ряд и выполнять почленное интегрирование.

Важной особенностью формулы Дайсона является то, что она легко может быть преобразована к релятивистски-инвариантному виду. Поэтому она имеет особенно большое значение при расчете релятивистских эффектов.

§ 97. Аналитические свойства S-матрицы

Как мы уже подчеркивали, с помощью аппарата S-матрицы может быть получен ряд важных результатов теории рассеяния, не связанных с использованием конкретного вида потенциала взаимодействия. Это связано, в частности, с изучением аналитических свойств S-матрицы[1]). В дальнейшем для простоты выкладок мы ограничимся случаем упругого рассеяния. При этом элементы S-матрицы даются формулой (95,24).

Как было показано в § 35, асимптотическое выражение для регулярной в нуле радиальной составляющей волновой функции частицы с энергией $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ и моментом l имеют вид

$$\chi_{kl}=rR_{kl}=a_l(k)\exp\left[i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right]+b_l(k)\exp\left[-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right]. \tag{97,1}$$

При выводе (97,1) предполагалось, что потенциал спадает на больших расстояниях быстрее, чем по закону $\frac{1}{r}$.

Сравнивая выражение (97,1) с (86,2) и учитывая (95,24), можно выразить матричные элементы $S^l_{aa}\equiv S_l$ через постоянные $a_l(k)$ и $b_l(k)$:

$$S_l(k)=-\frac{a_l(k)}{b_l(k)}. \tag{97,2}$$

Будем теперь формально считать волновую функцию χ_{kl} и соответственно функцию $S_l(k)$ функциями комплексного переменного k. Покажем прежде всего, что функцию комплексного переменного $S_l(k)$ следует задать лишь в одном квадранте, а не на всей плоскости комплексного переменного k. Действительно, поскольку уравнение Шредингера не изменяется при замене k на $-k$, функция χ_{-kl}, в силу единственности решения, описывает то же состояние, что и функция χ_{kl}. Обе эти функции могут различаться лишь постоянным множителем. Заменяя в (97,1) k на $-k$, получаем

$$\frac{a_l(k)}{b_l(k)}=\frac{b_l(-k)}{a_l(-k)}.$$

Отсюда следует, что

$$S_l(k)=S_l^{-1}(-k). \tag{97,3}$$

Отметим далее, что так как уравнение Шредингера вещественно, функция $\overset{*}{\chi}_{kl}$ также должна совпадать, с точностью до постоянной, с функцией χ_{kl}. Отсюда снова легко получить, что

$$S_l(k)=\left(\overset{*}{S}_l(k)\right)^{-1} \tag{97,4}$$

Формула (97,4) получена для вещественных k. Совершая аналитическое продолжение на всю плоскость комплексных k,

[1]) Более подробное рассмотрение затронутых в этом параграфе вопросов и библиографию см. в книге А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, изд. 2-е, «Наука», 1971.

имеем

$$S_l(k) = \left(S_l^*(k^*)\right)^{-1}. \tag{97,5}$$

Соотношения (97,3), (97,5) связывают значения функции $S_l(k)$, заданных в одном из квадрантов плоскости комплексного переменного k с ее значениями в соответствующих точках остальных трех квадрантов. Из соотношения (97,4) следует, что при вещественном k $|S_l(k)|^2 = 1$, т. е фаза δ_l вещественна $(S_l = e^{2i\delta_l})$. Наоборот, на мнимой оси, как видно из (97,5) и (97,3), функция $S_l(k)$ вещественна, так что фаза δ_l является мнимой.

Рассмотрим расположение особенностей функции $S_l(k)$. Предположим, потенциалу $U(r)$ отвечает связанное состояние частицы с энергией $-E_0$. Связанное состояние описывается волновой функцией $\chi_{k_0 l}$, регулярной в нуле и затухающей на больших расстояниях как $e^{-|k_0|r}$, где $k_0 = i\sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$. Следовательно, функция χ_{kl}, аналитически продолженная на комплексную плоскость, должна затухать при $k = k_0$ как $e^{-|k_0|r}$. Поэтому в точке $k = k_0$ должно выполняться соотношение $b_l(k_0) = 0$. В соответствии с формулой (97,2) функция $S_l(k)$ имеет в точке $k = k_0$ полюс. В симметричной точке, расположенной в нижней полуплоскости, т. е. при $k = -k_0$, функция $S_l(k)$, как это следует из (97,3), обращается в нуль. Таким образом, мы приходим к выводу, что каждому связанному состоянию отвечает полюс функции $S_l(k)$, расположенный в соответствующей точке верхней мнимой полуоси на плоскости комплексного переменного k. Следует отметить, что на мнимой полуоси могут возникать и так называемые «ложные» полюсы, не отвечающие никакому стационарному состоянию. Можно показать (см. сноску на стр. 405), что «ложные» полюсы не возникают при введении так называемого радиуса обрезания R, т. е. при введении условия $U(r) = 0$ при $r > R$, где радиус R может быть сколь угодно большим.

Отметим, что функция $S_l(k)$ не может иметь полюсов в верхней полуплоскости, расположенных где-либо вне мнимой полуоси. Действительно, такому полюсу отвечало бы комплексное значение энергии связанного состояния, что невозможно.

Функция $S_l(k)$ может иметь полюсы и в нижней полуплоскости, причем здесь они могут располагаться и не на мнимой полуоси. Как это сразу следует из соотношений (97,3), (97,5), эти полюсы должны располагаться парами, симметрично относительно мнимой полуоси. В верхней полуплоскости этим полюсам отвечают нули функции $S_l(k)$. Легко видеть, что полюсам, расположенным в нижней полуплоскости, отвечает волновая функция, экспоненциально возрастающая на больших расстояниях. Такая волновая функция, конечно, не может отвечать связанному состоянию. Можно показать, что полюсам в нижней полуплоскости отвечают квазистационарные состояния системы, т. е. состояния, распадающиеся в течение некоторого конечного времени T.

Найдем вычет функции $S_l(k)$ относительно полюса, которому отвечает связанное состояние с энергией $E = -E_0$ или значение $k = k_0 = i\sqrt{2m|E_0|/\hbar^2}$. Обозначая этот вычет через c_l, представим функцию $S_l(k)$ в окрестности точки $k = k_0$ в виде

$$S_l = \frac{c_l}{k - k_0}. \tag{97,6}$$

Величина c_l связана простым соотношением с амплитудой волновой функции, отвечающей стационарному состоянию с энергией $E = -E_0$. Чтобы установить это соотношение, напишем уравнения, которым удовлетворяет функция χ_{kl} и ее производная по энергии:

$$\chi''_{kl} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)\chi_{kl} = 0,$$

$$\left(\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E}\right)'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E} = -\frac{2m}{\hbar^2}\chi_{kl}.$$

Функцию χ_{kl} будем считать нормированной условием

$$\int_0^\infty |\chi_{kl}|^2\,dr = 1.$$

Умножая первое уравнение на $\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E}$, а второе на χ_{kl}, вычитая одно из другого и интегрируя по dr, получим

$$\chi'_{kl}\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E} - \chi_{kl}\left(\frac{\partial\chi_{kl}}{\partial E}\right)' = \frac{2m}{\hbar^2}\int_0^r \chi_{kl}^2\,dr. \tag{97,7}$$

Мы применим это соотношение при $E = -E_0$ и $r \to \infty$. Функции $a_l(k)$ и $b_l(k)$ разложим вблизи точки $k = k_0$ в ряд и переобозначим постоянную

$$a_l(k) = a_l(k_0) = A_l i^{-l}, \qquad b_l(k) = \beta_l(k - k_0). \tag{97,8}$$

Используя эти разложения и соотношения (97,7), (97,1), получаем

$$\beta_l = -\frac{i}{a_l} = -\frac{i^{l+1}}{A_l}. \tag{97,9}$$

Подставляя выражение (97,9) в (97,2), находим вычет c_l в точке $k = k_0$:

$$c_l = iA_l^2(-1)^{l+1}. \tag{97,10}$$

Таким образом, мы связали величину вычета c_l с амплитудой A_l в асимптотическом выражении волновой функции χ_{kl}, $\chi_{kl} = A_l e^{-|k_0|r}$ связанного состояния.

Исследование поведения фаз рассеяния $\delta_l(k)$, а следовательно, и функции $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$ и экстраполяция этих результатов в комплексную область дает возможность на основании (97,10) сделать определенные заключения и о волновой функции связанного состояния.

Аналитические свойства величин $S_l(k)$ позволяют получить важные соотношения, которым должна удовлетворять амплитуда рассеяния. Эти соотношения носят название дисперсионных соотношений. Наиболее простыми и вместе с тем наиболее существенными являются дисперсионные соотношения для амплитуды рассеяния на угол нуль, $f(0, k)$.

Дисперсионные соотношения устанавливают связь между действительной и мнимой частями амплитуды рассеяния $f(\vartheta, k)$

$$f(\vartheta,\ k) = \operatorname{Re} f(\vartheta,\ k) + i \operatorname{Im} f(\vartheta,\ k)$$

и основаны на использовании формулы Коши в теории аналитических функций.

Предположим, что $F(k)$ — некоторая функция, аналитическая в верхней полуплоскости комплексного переменного k, имеющая простые полюсы на верхней мнимой полуоси. Рассмотрим интеграл

$$\int\limits_C \frac{F(k')\,dk'}{k'-k},$$

взятый по контуру, изображенному на рис. 27.

Данный интеграл определяется суммой вычетов подынтегральной функции. Эти вычеты берутся в точке $k' = k$ и в точках $k' = k_1,\ k_2,\ \ldots$, где расположены полюса функции $F(k)$. Если функция $F(k)$ достаточно быстро стремится к нулю при $|k| \to \infty$, то интеграл по верхней полуокружности равен нулю. Тогда имеем

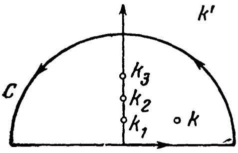

Рис. 27.

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')}{k'-k}\,dk' = 2\pi i\left(F(k) + \sum_n \frac{\operatorname{Res} F(k_n)}{k_n - k}\right). \tag{97,11}$$

Здесь через $\operatorname{Res} F(k_n)$ обозначен вычет функции F в точке $k' = k_n$. Пусть теперь мнимая часть k стремится к нулю, так что k стремится к точке k_0, расположенной на действительной оси.

В этом случае

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} = P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} + i\pi F(k_0). \qquad (97,12)$$

Здесь P означает, что интеграл понимается в смысле главного значения

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{-\infty}^{k_0-\varepsilon} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0} + \int_{k_0+\varepsilon}^{\infty} \frac{F(k')\,dk'}{k'-k_0}\right],$$

а второй член в правой части (97,12) возник из-за интегрирования, по малой полуокружности около точки $k = k_0$.

Основываясь на результатах (97,11), (97,12), получим дисперсионное соотношение для амплитуды рассеяния на угол нуль $f(0, k)$. Амплитуда $f(0, k)$ связана с матричными элементами S_l (95,24) соотношением (86,11)

$$f(0,\ k) = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)(S_l - 1). \qquad (97,13)$$

Из этого выражения следует, что полюсы функции $S_l(k)$ являются полюсами и функции $f(0, k)$, а других полюсов функция $f(0, k)$ не имеет. Точка $k = 0$ вообще не является полюсом, так как при $k \to 0$, $\delta \to 0$, $S_l \to 1$ (см. § 86). Таким образом, функция $f(0, k)$ аналитична в верхней полуплоскости комплексного переменного k и имеет полюсы на верхней мнимой полуоси. Дисперсионные соотношения для этой функции легко получить, если подставить в соотношения (97,11), (97,12) функцию $F(k)$ в виде

$$F(k) = f(0,\ k) - f(0,\ \infty). \qquad (97,14)$$

Из амплитуды $f(0, k)$ вычитается ее значение при $k \to \infty$ для того, чтобы обратился в нуль интеграл по большой полуокружности (см. рис. 27). При $k \to \infty$ в уравнении Шредингера можно пренебречь членом с потенциалом $U(\boldsymbol{r})$. Решение такого уравнения имеет вид плоской волны. Подставляя такое решение в (83,10), получаем

$$f(0,\ \infty) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\boldsymbol{r})\,dV. \qquad (97,15)$$

Выражение (97,15) представляет собой амплитуду рассеяния в борновском приближении (см. § 84), т. е. $f(0, \infty) = f_B$. Подставляя (97,14) в соотношения (97,11), (97,12) и учитывая, что интеграл с борновской амплитудой обращается в нуль, получаем

$$f(0, k) = f_B + \frac{1}{i\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(0, k')\,dk'}{k'-k} - 2 \sum_{n,\, l} \frac{\operatorname{Res} f(0, k_{nl})}{k_{nl}-k}. \qquad (97,16)$$

В этом соотношении k считается действительным, а индекс нуль мы опустили. Точки $k = k_{nl}$ лежат на верхней мнимой полуоси и отвечают полюсам функций $S_l(k)$. Суммирование в (97,16) проводится по всем связанным состояниям. Выражение для вычета функции S_l через амплитуду соответствующего связанного состояния дается формулой (97,10). Учитывая (97,13), имеем

$$\operatorname{Res} f(0, k_{nl}) = \frac{1}{2k_{nl}} A_{nl}^2 (-1)^{l+1} (2l+1). \qquad (97,17)$$

Соотношение (97,16) можно переписать в несколько ином виде, если учесть, что согласно (97,3) и (97,4) при действительном k $S_l(-k) = S_l^*(k)$ и соответственно [см. (97,13)] $f(0, -k) = f^*(0, k)$. Поэтому интегрирование в (97,16) может быть проведено только по имеющим физический смысл положительным значениям k. Приравнивая в (97,16) слева и справа действительные части, окончательно имеем

$$\operatorname{Re} f(0, k) = f_B + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{Im} f(0, k')\,k'\,dk'}{k'^2 - k^2} - \operatorname{Re} \sum_{n,\, l} \frac{A_{nl}^2 (-1)^{l+1} (2l+1)}{k_{nl}(k_{nl}-k)}. \qquad (97,18)$$

Входящая в правую часть равенства мнимая часть амплитуды $\operatorname{Im} f(0, k)$ может быть выражена согласно оптической теореме [см. (91,11)] через физически наблюдаемую величину — полное сечение рассеяния $\sigma(k)$. Поэтому и действительная часть $\operatorname{Re} f(0, k)$ согласно (97,18) может быть выражена через физически наблюдаемые величины. Дисперсионные соотношения находят в настоящее время широкую область применения. В частности, с их помощью можно сразу устранить отмеченную в § 95 неоднозначность выбора фаз при известном законе рассеяния, т. е. при известном эффективном сечении. Подчеркнем, что дисперсионные соотношения основаны на таком общем свойстве матрицы рассеяния, как ее аналитичность, вытекающем из принципа причинности.

§ 98. Обращение времени и принцип детального равновесия

Рассмотрим свойства S-матрицы, связанные с симметрией уравнения Шредингера по отношению к обращению времени. Мы уже касались этого вопроса в § 6 и сейчас рассмотрим его более подробно.