

§ 15. Замечание о потенциалах $1/r$

В предыдущих разделах всюду предполагалось, что потенциалы $V(r)$, $U_1(r)$ и $W_1(r)$ убывают на бесконечности быстрее, чем $1/r$. Это является необходимым условием того, чтобы различные волновые функции Грина, которые мы использовали, имели нужное асимптотическое поведение. Однако те же методы, с незначительной модификацией, могут быть применены в случае, когда оба потенциала, $V(r)$ и $U_1(r)$, ведут себя, как $1/r$ в предположении, что их разность $W_1(r)$ стремится к нулю быстрее, чем $1/r$. Асимптотики отличаются только присутствием в показателе экспоненты дополнительного слагаемого, пропорционального $\ln 2kr$. Асимптотики u_i и F_i претерпевают те же изменения. За исключением этих отличий, методы и результаты остаются в существенном теми же. В частности, верны определения (83) и (84) функций Грина, интегральное уравнение (97), основное уравнение (74), а также формула (75) в пределе, когда W_1 можно рассматривать как малое возмущение.

Раздел III. СЛОЖНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ И БОРНОВСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

§ 16. Общие понятия. Сечения

В данном разделе¹⁾ мы распространим исследования предыдущих разделов на случай столкновения любых двух частиц. Здесь мы понимаем слово «частица» в его широком смысле, считая, что частица может иметь сложную внутреннюю структуру. Для таких элементарных частиц как электроны, протоны, нейтроны внутренние переменные сводились только к спиновым переменным. Однако мы будем рассматривать также сложные (составные) частицы — ионы, атомы, атомные ядра и т. д., которые состоят из нескольких элементарных частиц.

Пусть столкновение происходит между двумя частицами A и X , элементарными или сложными. Тогда возможны три типа процессов:

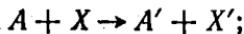
(а) *упругое рассеяние* — внутренние квантовые состояния частиц не меняются после столкновения

$$A + X \rightarrow A + X;$$

(б) *неупругое рассеяние* — кроме отклонения, в результате столкновения происходит изменение внутренних состояний ча-

¹⁾ Более подробное объяснение используемой в данном разделе терминологии см. в книгах: *C. Bloch. Cours sur la Théorie des réactions nucléaires*, Chap. I—III. Saclay (1955—1956); *Дж. Блэйтт, В. Вайсконф. Теоретическая ядерная физика*. М., ИЛ, 1954.

стиц¹⁾, например,



(в) *столкновение с перераспределением* (иначе говоря, *реакция*), когда частицы A и X в процессе столкновения обмениваются некоторыми из составляющих их элементарных частиц. Другими словами, система $(A + X)$ переходит в две или большее число частиц, отличных от исходных. Например, в процессе столкновения появляются частицы B и Y , отличные от A и X ,



Химическая реакция представляет собой рассеяние молекул с перераспределением, ядерная реакция есть столкновение с перераспределением между атомными ядрами. В дальнейшем будет приведено несколько таких примеров.

Столкновение двух частиц характеризуется такой величиной, как сечение. Для упругого рассеяния определение этой величины уже было дано в главе X (§ 2). В общем случае *сечение рассеяния для процесса определенного типа в данном столкновении равно числу событий этого типа в единицу времени от одного центра мишени при единичном потоке падающих на мишень частиц*.

Чтобы определить однозначно сечение для столкновения частиц A и X , необходимо точно задать начальные условия столкновения — квантовые состояния и относительные скорости этих частиц. Обычно в эксперименте одна из скоростей равна нулю, скажем, скорость частицы X . Мишень из частиц типа X практически покоится, она бомбардируетсяmonoэнергетическим пучком частиц типа A . Однако движение центра масс можно полностью отделить от относительного движения. Простое кинематическое рассмотрение позволяет установить связь сечений, которые соответствуют начальным условиям, отличающимся выбором разных систем отсчета. В частности, обобщая очевидным образом метод § X. 7 (см. задачу X. 2), мы можем получить связь сечений в лабораторной системе (скорость частицы X равна нулю) с сечениями в системе центра масс (скорость центра масс равна нулю). В дальнейшем рассматриваются только сечения в системе центра масс.

Энергию в системе центра масс будем обозначать буквой E , гамильтониан относительного движения — H (прибавляя энергию центра масс, получаем полный гамильтониан).

¹⁾ Таковым может быть простой переворот спина. Принятое здесь определение несколько отличается от обычного, согласно которому процесс рассеяния считается неупругим или упругим в зависимости от того, изменилась ли внутренняя энергия частиц или нет.

§ 17. Каналы

Важную роль при изучении сложных столкновений играет понятие *канала реакции*. Так называют каждую возможную моду деления системы в результате столкновения. Одна из таких мод — сами две сталкивающихся частицы — называется *входящим каналом*. При упругом рассеянии две частицы остаются во входящем канале. При двух других типах столкновений выходящий канал отличен от входящего. Это будет неупругое рассеяние или рассеяние с перераспределением в зависимости от того, имеем ли мы в выходящем канале реакции те же частицы, что и во входящем, или другие. Каждый канал будем обозначать какой-либо греческой буквой.

С каналом можно связать некоторое число параметров. Для простоты будем всегда предполагать, что каналы реакции состоят только из двух частиц.

Рассмотрим канал γ , который содержит частицы C и Z . Вектор r_γ определяет положение частицы C по отношению к Z , другими словами, $r_\gamma = r_C - r_Z$, где r_C и r_Z — координаты центров масс C и Z . Так же определяется относительный импульс p_γ и приведенная масса

$$M_\gamma = \frac{M_C M_Z}{M_C + M_Z}.$$

Кинетическая энергия в канале γ равна $p_\gamma^2/2M_\gamma$.

Волновая функция Φ_γ , которая нормирована на единицу и описывает внутреннее квантовое состояние частиц канала, равна произведению волновых функций φ_C и φ_Z частиц C и Z . Если обозначить гамильтониан частиц h_C и h_Z , то получим равенства

$$\begin{aligned} h_C \varphi_C &= e_C \varphi_C, & h_Z \varphi_Z &= e_Z \varphi_Z, \\ \Phi_\gamma &= \varphi_C \varphi_Z, & e_\gamma &= e_C + e_Z, \end{aligned}$$

где e_γ — полная внутренняя энергия частиц канала γ .

Пусть V_γ — потенциал взаимодействия частиц C и Z , т. е. сумма потенциалов взаимодействия между каждой элементарной частицей, содержащейся в C , и каждой элементарной частицей, содержащейся в Z . В пределе $r_\gamma \rightarrow \infty$ значение V_γ стремится к нулю. Мы будем всегда считать, что V_γ убывает быстрее, чем $1/r_\gamma$. Как отмечалось в § 15, обобщение результатов на потенциалы вида $1/r_\gamma$ не представляет серьезных трудностей.

Гамильтониан системы равен

$$H = H_\gamma + V_\gamma, \quad (105)$$

где

$$H_\gamma = h_C + h_Z + p_\gamma^2/2M_\gamma. \quad (106)$$

§ 18. Вычисление сечений. Т-матрицы

В рассмотренном выше столкновении входящим является канал $(A + X)$, который мы обозначим буквой α . Чтобы фиксировать начальные условия, нужно задать еще относительный импульс $\hbar \mathbf{k}_a$ частиц в начальном состоянии. Полные начальные условия обозначим индексом $a \equiv (\alpha, \mathbf{k}_a)$. Имеем

$$E = e_a + \hbar^2 k_a^2 / 2M_a. \quad (107)$$

Допустим, что возможна реакция $A + X \rightarrow B + Y$. В этом случае канал $(B + Y)$ или β называют *открытым каналом*. В силу закона сохранения энергии частицы канала β имеют вполне определенную величину относительного импульса $\hbar \mathbf{k}_b$

$$E = e_\beta + \hbar^2 k_b^2 / 2M_\beta. \quad (108)$$

Для того чтобы канал β был открытым, очевидно, необходима положительность $E - e_\beta$.

С каждым набором начальных условий a можно связать плоскую волну

$$\Phi_a = \varphi_a e^{i \mathbf{k}_a \mathbf{r}_a} \quad (109)$$

и две стационарных волны, $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_a^{(-)}$. Волна $\Psi_a^{(+)}$ есть стационарное решение H , отвечающее энергии E и имеющее во входящем канале асимптотическое поведение ($e^{i \mathbf{k}_a \mathbf{r}_a} +$ расходящаяся волна), а во всех других открытых каналах — поведение чисто расходящейся волны. $\Psi_a^{(-)}$ определяется аналогичным образом, но со сходящимися волнами. В соответствии с этими определениями имеем равенства

$$H_a \Phi_a = E \Phi_a, \quad (110)$$

$$H \Psi_a^{(\pm)} = E \Psi_a^{(\pm)}, \quad (111)$$

а для любого открытого канала γ (мы предполагаем, что ни один из них не содержит более двух частиц)

$$\begin{aligned} \Psi_a^{(\pm)} &\underset{r_a \rightarrow \infty}{\sim} \varphi_a [e^{i \mathbf{k}_a \mathbf{r}_a} + f_{aa}^{(\pm)}(\Omega_a) e^{\pm i \mathbf{k}_a \mathbf{r}_a} / r_a], \\ \Psi_\gamma^{(\pm)} &\underset{r_\gamma \rightarrow \infty}{\sim} \varphi_\gamma f_{\gamma\gamma}^{(\pm)}(\Omega_\gamma) e^{\pm i \mathbf{k}_\gamma \mathbf{r}_\gamma} / r_\gamma \quad (\gamma \neq a). \end{aligned} \quad (112)$$

Не вдаваясь в обсуждения, мы считаем, что стационарные решения $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_a^{(-)}$ существуют.

Сечения рассеяния непосредственно связаны с асимптотическим поведением $\Psi_a^{(+)}$. Пусть $d\sigma_{a \rightarrow b} / d\Omega_\beta$ — сечение испускания

частицы B в направлении Ω_b . Находим

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega_b} = \frac{v_b}{v_a} |f_{ab}^{(+)}(\Omega_b)|^2, \quad (113)$$

где $v_a = \hbar k_a / M_a$ — скорость налетающей частицы, а $v_b = \hbar k_b M_b$ — скорость частицы B , появившейся в результате столкновения. Вывод этой формулы аналогичен приведенному в §§ 4—6 главы X¹⁾ и предоставляем читателю.

Обобщая рассуждения § 3, мы приходим к описанию процесса с энергией E посредством матрицы перехода T :

$$T_{a \rightarrow b} \equiv \langle b | T | a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_b} f_{ab}^{(+)}(\Omega_b). \quad (114)$$

Используя формулы (112) и (113), получаем

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega_b} = \frac{2\pi}{\hbar v_a} |T_{a \rightarrow b}|^2 \rho_b(E), \quad (115)$$

где $\rho_b(E)$ задает плотность конечных состояний в соответствии с определением § XVII. 5. Полученная формула представляет обобщение формулы (19'). $T_{a \rightarrow b}$ есть амплитуда перехода $a \rightarrow b$.

§ 19. Интегральные представления амплитуды перехода

Чтобы найти интегральные представления для $T_{a \rightarrow b}$, нужно несколько модифицировать соотношение (9).

Пусть H и \hat{H} — два возможных гамильтониана исследуемой квантовой системы. H и \hat{H} имеют одну и ту же кинетическую энергию, но их потенциальные энергии могут быть различны. Мы будем считать, что отличие сводится к членам, которые убывают на бесконечности быстрее, чем $1/r$. Стационарные решения для H и \hat{H} с энергией E обозначим Ψ и $\hat{\Psi}$ соответственно. Отметим, что ряд каналов может быть открыт для столкновений, описываемых H , и закрыт для столкновений, описываемых \hat{H} , и наоборот. Пусть канал b открыт для столкновений, которые описываются гамильтонианом \hat{H} . Следовательно, существует решение $\hat{\Psi}_b^{(-)}$, отвечающее начальным условиям $b \equiv (\beta, \mathbf{k}_b)$. Оно удовлетворяет уравнению

$$\hat{H} \hat{\Psi}_b^{(-)} = E \hat{\Psi}_b^{(-)} \quad (116)$$

¹⁾ Этот результат можно также получить, используя рассуждения § X. 2: сечение равно отношению потока частиц B , $v_b |f_{ab}^{(+)}(\Omega_b)|^2$ к падающему потоку v_a .

и для любого открытого канала δ (напомним, что по предположению любой канал имеет не более двух частиц) имеет асимптотики

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_b^{(-)} &\underset{r_\beta \rightarrow \infty}{\sim} \Phi_\beta [e^{i k_b r_\beta} + f_{bb}^{(-)}(\Omega_\beta) e^{-i k_b r_\beta} / r_\beta] \\ \hat{\Psi}_b^{(-)} &\underset{r_\delta \rightarrow \infty}{\sim} \Phi_\delta f_{b\delta}^{(-)}(\Omega_\delta) e^{-i k_\delta r_\delta} / r_\delta \quad (\delta \neq \beta).\end{aligned}\quad (117)$$

Можно показать, что

$$\langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta} f_{ab}^{(+)}(\Omega_b) + \frac{2\pi\hbar^2}{M_a} f_{ba}^{(-)*}(-\Omega_a). \quad (118)$$

Метод доказательства тот же, что и в случае соотношения (9). Умножая уравнение (111) на $\hat{\Psi}_b^{(-)*}$, а комплексно сопряженное к уравнению (116)—на $\Psi_a^{(+)}$ и вычитая результаты друг из друга, получаем

$$[\hat{\Psi}_b^{(-)*} (H \Psi_a^{(+)}) - (\hat{H} \hat{\Psi}_b^{(-)})^* \Psi_a^{(+)}] + \hat{\Psi}_b^{(-)*} (H - \hat{H}) \Psi_a^{(+)} = 0.$$

К соотношению (118) приходим после суммирования по спиновым переменным и интегрирования по всему конфигурационному пространству. Несмотря на то, что оператор H эрмитов, вклад от выражения в квадратных скобках может быть отличен от нуля, поскольку ни одно из решений Ψ , $\hat{\Psi}$ не имеет конечной нормы. Чтобы сосчитать этот вклад, вычислим вначале интеграл по конечному объему конфигурационного пространства, а затем рассмотрим предел этого интеграла, когда объем стремится к бесконечности. Используя теорему Грина, интеграл по объему можно преобразовать в интеграл по поверхности¹⁾. Последний имеет вид суммы, слагаемые которой отвечают различным открытым каналам v , общим для Ψ и $\hat{\Psi}$,

$$\langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle = \sum_v \frac{\hbar^2}{2M_v} \lim_{R_v \rightarrow \infty} \{ \hat{\Psi}_a^{(-)*}, \Psi_b^{(+)} \}_v. \quad (119)$$

¹⁾ Напомним, что существует много способов выделения центра масс, однако величина

$$x = \left(\sum_i M_i r_i^2 \right)^{1/2}$$

не зависит от способа. Здесь $r_1, r_2, \dots, r_i, \dots$ — относительные координаты, отвечающие выбранному способу, а $M_1, M_2, \dots, M_i, \dots$ — соответствующие массы (см. § IX. 13). Упомянутый объем интегрирования можно определять условием $x \leq X$, где X — положительная константа, которая велика по сравнению с радиусом взаимодействия. Используя теорему Грина, можно преобразовать интеграл по объему в интеграл по гиперповерхности $x = X$, который при $X \rightarrow \infty$ стремится к выражению, стоящему в правой части формулы (119).

Символ $\{\dots\}_v$ аналогичен обозначению, которое было использовано в § 2. По определению

$$\{F_1, F_2\}_v = \left\langle \int \left(F_1 \frac{\partial F_2}{\partial r_v} - F_2 \frac{\partial F_1}{\partial r_v} \right) \Big|_{r_v=R_v} R_v^2 d\Omega_v \right\rangle,$$

где символ $\left\langle \int \dots d\Omega_v \right\rangle$ означает суммирование или интегрирование по всем переменным кроме относительного расстояния r_v . Различные слагаемые в правой части равенства (119) можно вычислить, подставляя вместо Ψ , $\hat{\Psi}$ и их радиальных производных соответствующие асимптотические выражения (112) и (117). Для любого канала, отличного от α и β , $\Psi_a^{(+)}$ представляет собой чисто расходящуюся волну, а $\Psi_b^{(-)}$ — чисто сходящуюся волну, следовательно, $\{\dots\}_v$ асимптотически стремится к нулю. Для каналов α и β получаем отличный от нуля вклад, поскольку в одном из двух асимптотических выражений присутствует плоская волна. Вычисление аналогично выполненному в § 2 и приводит к двум членам, стоящим в правой части соотношения (118).

Важное соотношение (118) можно преобразовать к более удобному виду. Для этого выпишем (118) в частном случае, когда $A = H$. Левая часть обращается в нуль, и мы имеем

$$\frac{1}{M_\beta} f_{ab}^{(+)}(\Omega_b) = \frac{1}{M_a} f_{ba}^{(-)*}(-\Omega_a).$$

Сравнивая это равенство с определением T (ур. (114)), получаем эквивалентное определение

$$\langle b | T | a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_a} f_{ba}^{(-)*}(-\Omega_a). \quad (114')$$

Эти же определения справедливы и для матрицы перехода \hat{T} , связанной с гамильтонианом H . Таким образом, соотношение (118) можно также записать так:

$$\langle b | T | a \rangle = \langle b | \hat{T} | a \rangle + \langle \hat{\Psi}_b^{(-)} | (H - \hat{H}) | \Psi_a^{(+)} \rangle. \quad (120)$$

Именно в этом виде мы и будем его использовать.

Это соотношение выполняется и в случае, когда канал α закрыт для волны $\hat{\Psi}_b^{(-)}$, если положить $\langle b | \hat{T} | a \rangle = 0$. Оно выполняется также в случае, когда канал β закрыт для $\Psi_a^{(+)}$, если положить $\langle b | T | a \rangle = 0$.

В частности, если $A = H_\beta$, то $\hat{\Psi}_b^{(-)}$ сводится к плоской волне Φ_β и поскольку $H - H_\beta = V_\beta$, соотношение (120) дает

$$\langle b | T | a \rangle = \langle \Phi_\beta | V_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle. \quad (121)$$

Заменяя H на H_α и \hat{H} на H , получаем

$$\langle b | T | a \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | V_a | \Phi_a \rangle. \quad (122)$$

Выведенные нами соотношения справедливы для любых типов столкновений: упругого рассеяния ($\alpha = \beta$), неупругого рассеяния ($\alpha \neq \beta$, $V_\alpha = V_\beta$) или рассеяния с перераспределением ($V_\alpha \neq V_\beta$).

§ 20. Борновское приближение и его обобщения

Подставляя в правую часть равенства (121) вместо $\Psi_a^{(+)}$ плоскую волну Φ_a , получаем амплитуду перехода $a \rightarrow b$ в борновском приближении (см. ур. (23))

$$T_{a \rightarrow b} \approx T_{a \rightarrow b}^{(B)} = \langle \Phi_b | V_\beta | \Phi_a \rangle. \quad (123)$$

То же приближение получается после подстановки в правую часть (122) плоской волны Φ_b вместо $\Psi_b^{(-)}$. Действительно, если мы заменим H на H_α и \hat{H} на H_β , то из соотношения (120) получим

$$\langle \Phi_b | V_\beta | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | V_\alpha | \Phi_a \rangle. \quad (124)$$

Можно также записать

$$T_{a \rightarrow b}^{(B)} = \langle \Phi_b | V_\alpha | \Phi_a \rangle. \quad (124')$$

Переход от (121) к (123) оправдан, если $\Psi_a^{(+)}$ мало отличается от Φ_a в области, где отличен от нуля потенциал V_β . Точно так же для перехода от (122) к (124') достаточно, чтобы $\Psi_b^{(-)}$ мало отличалось от Φ_b в области, где сосредоточен потенциал V_α . Эти два условия эквивалентны, хотя на первый взгляд кажутся различными. Оба условия предполагают, что $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_b^{(-)}$ можно заменить плоскими волнами Φ_a и Φ_b соответственно.

Более точные выражения получаются, если вместо плоских волн использовать волновые функции, которые лучше аппроксимируют стационарные решения $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_b^{(-)}$.

Допустим, например, что V_α можно представить в виде

$$V_\alpha = U_\alpha + W_\alpha$$

и что известны стационарные решения для гамильтониана $H_\alpha + U_\alpha$, отвечающие энергии E . Обозначим эти решения X_α , а соответствующую матрицу перехода — $T^{(X)}$. В частности, $X_\alpha^{(+)}$ будет обозначать решение с расходящимися волнами, отвечаю-

щее начальным условиям a , и мы имеем

$$T_{a \rightarrow b}^{(X)} = \langle \Phi_b | (H_a + U_a - H_b) | X_a^{(+)} \rangle = \langle \Phi_b | (V_b - W_a) | X_a^{(+)} \rangle. \quad (125)$$

Если W_a достаточно мало, то $X_a^{(+)}$ будет мало отличаться от $\Psi_a^{(+)}$.

Точно так же предположим, что V_b можно представить в виде

$$V_b = U_b + W_b$$

и известны стационарные решения для гамильтониана $H_b + U_b$, отвечающие энергии E . Будем обозначать эти решения Ξ_b , а соответствующую матрицу перехода — $T^{(\Xi)}$. В частности, $\Xi_b^{(-)}$ будет решение со сходящимися волнами, отвечающее начальным условиям b , и мы имеем

$$T_{a \rightarrow b}^{(\Xi)} = \langle \Xi_b^{(-)} | (V_b - W_b) | \Phi_a \rangle. \quad (126)$$

Если W_b достаточно мало, то $\Xi_b^{(-)}$ будет мало отличаться от $\Psi_b^{(-)}$.

В силу соотношения (120) имеем

$$T_{a \rightarrow b} = T_{a \rightarrow b}^{(X)} + \langle \Psi_b^{(-)} | W_a | X_a^{(+)} \rangle = \quad (127)$$

$$= T_{a \rightarrow b}^{(\Xi)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_b | \Psi_a^{(+)} \rangle. \quad (128)$$

Эти два выражения для $T_{a \rightarrow b}$ являются точными. Заменяя в первом из них $\Psi_b^{(-)}$ на $\Xi_b^{(-)}$ или $\Psi_a^{(+)}$ на $X_a^{(+)}$ — во втором, получаем приближенные выражения

$$T_{a \rightarrow b} \approx T_{a \rightarrow b}^{(X)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_a | X_a^{(+)} \rangle \approx \quad (129)$$

$$\approx T_{a \rightarrow b}^{(\Xi)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_b | X_a^{(+)} \rangle. \quad (130)$$

Хотя формально эти выражения различны при $W_a \neq W_b$, они всегда равны друг другу, что легко увидеть, если воспользоваться соотношением (120) с $H_a + U_a$ вместо H и $H_b + U_b$ вместо H .

Данные формулы представляют собой обобщение борновского приближения (см. ур. (75)). Они точнее тех, которые получаются после простой замены $\Psi_a^{(+)}$ в выражении (121) на $X_a^{(+)}$. Действительно, поскольку справедливо равенство (ур. (125))

$$\langle \Phi_b | V_b | X_a^{(+)} \rangle = T_{a \rightarrow b}^{(X)} + \langle \Phi_b | W_a | X_a^{(+)} \rangle,$$

последнее приближение сводится к замене $\Psi_b^{(-)}$ в выражении (127) на Φ_b , а не на $\Xi_b^{(-)}$. По этим же причинам формулы (129) и (130) точнее тех, которые получаются после замены $\Psi_b^{(-)}$ на $\Xi_b^{(-)}$ в правой части равенства (122).

§ 21. Рассеяние быстрых электронов атомом

В качестве иллюстрации собственно борновского приближения рассмотрим рассеяние быстрых электронов атомом.

Ядро атома будем считать бесконечно тяжелым и расположенным в начале координат. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + h + V(r, A).$$

Первое слагаемое — кинетическая энергия налетающего электрона, второе — гамильтониан атома, третье слагаемое представляет собой энергию взаимодействия

$$V(r, A) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{l=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_l|}, \quad (131)$$

где \mathbf{r} — координаты налетающего электрона, а $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z$ — координаты электронов атома. Пусть

$$\Phi_0, \Phi_1, \dots, \Phi_n, \dots —$$

собственные функции гамильтониана h , а

$$e_0, e_1, \dots, e_n, \dots —$$

соответствующие собственные значения.

Рассмотрим процесс неупругого рассеяния, когда импульс электрона меняется от $\hbar k_0$ до $\hbar k_n$, а атом переходит из основного состояния Φ_0 в возбужденное состояние Φ_n . В силу закона сохранения энергии имеем

$$\hbar^2 (k_0^2 - k_n^2) = 2m (e_n - e_0).$$

Обозначим переданный импульс $\hbar q$

$$q = k_n - k_0.$$

Отметим, что соотношение (24) здесь не выполняется, вместо него справедливо следующее равенство:

$$q^2 = (k_0 - k_n)^2 + 4k_0 k_n \sin^2 \frac{1}{2} \theta. \quad (132)$$

В дополнение к прямому процессу, когда налетающий электрон, теряя часть кинетической энергии, просто рассеивается, возможен и обмен налетающего электрона с одним из электронов атома. Обменный эффект может быть значителен в том случае, когда скорость рассеянного электрона равна по порядку величины скорости электронов атома, т. е. $k_n a \approx 1$. При тех условиях, когда применимо борновское приближение, этот эффект мал и им можно пренебречь. Мы будем рассматривать также налетающий электрон как частицу, отличную от электронов

атома. Используя формулу (123) для амплитуды перехода в борновском приближении, получаем

$$T_{0 \rightarrow n} \approx \int e^{-iqr} \varphi_n^*(A) V(r, A) \varphi_0(A) d\mathbf{r} dA. \quad (133)$$

Это есть борновское приближение для амплитуды перехода частицы при переданном импульсе $\hbar q$ в потенциале

$$V_n(\mathbf{r}) \equiv \int \varphi_n^*(A) V(r, A) \varphi_0(A) dA. \quad (134)$$

Результат справедлив при любом n , в частности, при упругом рассеянии ($n = 0$).

Чтобы преобразовать ответ к виду, аналогичному тому, который был получен в § 8, введем «электронную плотность»

$$\rho_n(\mathbf{r}) = Z \int \varphi_n^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) \varphi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_Z \quad (135)$$

и соответствующий форм-фактор

$$F_n(q) = \int e^{-iqr} \rho_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

В случае упругого рассеяния ($n = 0$) мы имеем просто электронную плотность основного состояния и соответствующий форм-фактор (см. ур. (48))

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \rho(r), \quad F_0(q) = F(q).$$

Если подставить явное выражение для $V(r, A)$ из уравнения (131) в определение $V_0(\mathbf{r})$, то мы увидим, что $V_0(\mathbf{r})$ представляет собой потенциал кулоновского взаимодействия электрона и заряда с распределением

$$e[Z\delta(\mathbf{r}) - \rho(r)].$$

Именно такой потенциал использовался в § 8. Таким образом, мы получили обоснование использованной там модели.

Рассмотрим теперь неупругое рассеяние ($n \neq 0$). Подставим явное выражение для $V(r, A)$ в определение (131). Поскольку функции φ_0 и φ_n ортогональны, вклад от члена Ze^2/r исчезает. Другие члены дают потенциал взаимодействия электрона с плотностью заряда $-e\rho_n(\mathbf{r})$. Повторяя рассуждения § 8, находим

$$T_{0 \rightarrow n} \approx -4\pi e^2 F_n(q) \quad (n \neq 0)$$

и, следовательно, в борновском приближении сечение неупругого рассеяния равно

$$\frac{d\sigma_{0 \rightarrow n}}{d\Omega} = 4 \frac{m^2 e^4}{\hbar^4} \frac{k_n}{k_0} \frac{|F_n(q)|^2}{q^4}. \quad (136)$$

Отметим, что данная формула подобна формуле (49) для упругого рассеяния. Зависимость от углов определяется множителем $|F_n(\mathbf{q})|^2/q^4$. Свойства функции $F_n(\mathbf{q})$ легко вывести из свойств $\rho_n(\mathbf{r})$. Так, $F_n(0) = 0$. Если a — радиус атома, то функция $F_n(\mathbf{q})$ в существенном отлична от нуля только в области $qa \leq 1$. В случае применимости борновского приближения ($\gamma \ll 1$) имеем $k_0 a \gg 1$, т. е. энергия столкновения значительно больше расстояния между атомными уровнями, которое имеет порядок \hbar^2/ma^2 . Следовательно, $(k_0 - k_n)a$ имеет порядок $1/k_0 a$. Когда q меняется от $k_0 - k_n$ до $k_0 + k_n$, угол θ меняется от нуля до 2π , а qa меняется от $1/k_0 a$ до $2k_0 a$ (см. ур. (132)). Согласно приведенным рассуждениям наибольшую вероятность имеет рассеяние электрона в интервал углов, для которых $qa \leq 1$, т. е. в область малых углов

$$\theta \leq \frac{1}{k_0 a}.$$

В принципе неупругое рассеяние можно использовать для измерения координат электрона. Согласно предположению, поперечные размеры падающего волнового пакета значительно больше a и, следовательно, неопределенность величины поперечной компоненты импульса значительно меньше \hbar/a . Сразу после неупругого рассеяния, считая, что мы можем определить изменение квантового состояния атома, координаты электрона становятся известны с точностью порядка a . Однако направление импульса электрона становится известным лишь с точностью $1/k_0 a$, неопределенность в поперечной компоненте упомянутого импульса имеет порядок \hbar/a . Это полностью согласуется с тем, что было сказано в главе IV 1 тома об измерениях координат (см. в частности, обсуждение измерений с помощью камеры Вильсона, сноска ⁷⁾ на стр. 144. 1 тома).

§ 22. Кулоновское возбуждение ядер

Для иллюстрации обобщенного борновского приближения вернемся к задаче, которая уже рассматривалась в § XVII. 3, и при ее решении откажемся от использованного там классического приближения.

Если не оговорено противное, то используются обозначения § XVII. 3. Будем считать энергию столкновения достаточно малой, так что справедливо условие (XVII. 28). С другой стороны, условия (XVII. 29) и (XVII. 30), т. е. условия применимости классического приближения, могут не выполняться. Так как энергия столкновения меньше высоты кулоновского барьера Ze^2/R , протон «проникает» в ядро в процессе столкновения очень незначительно. Следовательно, эффекты, вызванные ядер-

ными взаимодействиями, малы и в данный момент мы их рассматривать не будем. Тогда столкновение описывается гамильтонианом $H^{(0)} + V$.

Пусть a и b — набор данных, которые описывают начальные и конечные условия столкновения, а $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ — соответствующие собственные функции оператора $H^{(0)}$. Поскольку в $H^{(0)}$ переменные, описывающие протон, и переменные ядра полностью разделены, функция $X_a^{(+)}$ есть произведение волновой функции ядра в состоянии α и кулоновской рассеянной волны $\xi_a^{(+)}(\mathbf{r})$, описывающей стационарное состояние рассеяния протона с энергией E и импульсом $\hbar \mathbf{k}_a$ на потенциале Ze^2/r . Точно так же $X_b^{(-)}$ есть произведение волновой функции ядра в состоянии β и кулоновской волны $\xi_b^{(-)}(\mathbf{r})$ сходящегося типа¹⁾, которая описывает состояние рассеяния протона с энергией $(E - \Delta E)$ и импульсом $\hbar \mathbf{k}_b$ на потенциале Ze^2/r . Так как $X_a^{(+)}$ не дает вклада в канал β , точная формула (127) принимает вид

$$T_{a \rightarrow b} = \langle \Psi_b^{(-)} | V | X_a^{(+)} \rangle.$$

Если V рассматривать как малое возмущение, то его вкладом в $\Psi_b^{(-)}$ можно пренебречь и заменить $\Psi_b^{(-)}$ на $X_b^{(-)}$, получив, в согласии с обобщенным борновским приближением (129), следующий ответ:

$$T_{a \rightarrow b} = \langle X_b^{(-)} | V | X_a^{(+)} \rangle.$$

Поскольку при $r < R$ волны X практически равны нулю, мы можем заменить потенциал V его разложением (XVII. 34), что дает

$$\begin{aligned} T_{a \rightarrow b} &= \sum_{l, m} (-1)^m R_l^{-m} \langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M^\alpha \rangle, \\ R_l^m &= \frac{4\pi Ze}{2l+1} \int \xi_b^{(-)*}(\mathbf{r}) \frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}} \xi_a^{(+)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (137)$$

Воспользовавшись формулой (115), получаем сечение кулоновского возбуждения. Выражение для него аналогично выражению для сечения в полуклассической теории. Последнее получается из первого заменой R_l^m на $A(d\sigma_R/d\Omega)^{\frac{1}{2}} S_l^m$, где положительная константа A определяется соотношением: $A^2 = 4\pi^2 \hbar^4 v_a / M^2 v_b$. Действительно, в пределе, когда выполнены условия (XVII. 29) — (XVII. 30), основной вклад в интеграл R_l^m

¹⁾ Ее разложение по сферическим функциям дает уравнение (77), в котором в качестве F_l берутся регулярные кулоновские решения. Отметим, что $\xi_b^{(-)} = \xi_b^{(+)*}$.

дает окрестность классической траектории, и применение метода стационарной фазы приводит к полуklassическому ответу.

Обсуждение правил отбора, которое было проведено в конце § XVII.3, может быть без изменений повторено и в данном случае. В частности, если в эксперименте ядра мишени не ориентированы и не измеряется поляризация возбужденных ядер, то имеем

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \frac{1}{(2J_a + 1)(2l_0 + 1)} \frac{M^2 v_b}{4\pi^2 \hbar^4 v_a} |\langle \beta || Q^{(l_0)} || a \rangle|^2 \left(\sum_m |R_{l_0}^m|^2 \right).$$

В приведенные выше рассуждения можно включить также и ядерные взаимодействия. Пусть V_{pA} — потенциал ядерного взаимодействия протона с нуклонами ядра A . Потенциал V_{pA} очень велик в области $r < R$ и практически равен нулю при $r > R$. Мы будем включать V_{pA} в оператор $H^{(0)}$. Удобно разбить потенциал V на внешнюю и внутреннюю части: $V = V_{\text{int}} + V_{\text{ext}}$ согласно определению

$$V_{\text{ext}} = \begin{cases} V, & \text{если } r > R, \\ 0, & \text{если } r < R, \end{cases}$$

и часть V_{int} также включить в $H^{(0)}$. После таких модификаций использованное выше разделение переменных уже не имеет места, а $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ не равны более чисто упруго рассеянным волнам. Согласно обобщенному борновскому приближению имеем

$$T_{a \rightarrow b} \approx T_{a \rightarrow b}^{(X)} + \langle X_b^{(-)} | V_{\text{ext}} | X_a^{(+)} \rangle.$$

Первое слагаемое $T_{a \rightarrow b}^{(X)}$ описывает ядерное возбуждение. Оно равно амплитуде перехода, которая получается при замене взаимодействия протона с ядром во внешней области ($r > R$) чисто кулоновским взаимодействием. При этом возбуждение $\alpha \rightarrow \beta$ возможно, только если протон проникает в ядро. Второе слагаемое описывает собственно кулоновское возбуждение.

Из-за существования кулоновского барьера и характера ядерных сил (короткодействующие и большие) волны $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ при низких энергиях имеют узкие резонансы, подобные тем, которые исследовались в главе X (раздел IV). Зная характеристики эти резонансы параметры — энергию, ширину резонанса в различных открытых каналах — можно построить волны $X_a^{(+)}$ и $X_b^{(-)}$ во внешней области¹⁾ и вычислить два члена амплитуды рассеяния. Вне резонансов протон практически не проникает в ядро, амплитуда $T_{a \rightarrow b}^{(X)}$ пренебрежимо мала, и ам-

¹⁾ Детальное рассмотрение этого вопроса содержится в работе, упомянутой в первой сноске к § 16.

плитуда кулоновского возбуждения с очень хорошей точностью даётся формулой (137), в которой волны X равны чисто кулоновским рассеянным волнам. При переходе через резонанс вкладом амплитуды $T_{a \rightarrow b}^{(X)}$ нельзя пренебречь, а ее зависимость от энергии имеет типично резонансный вид (см. ур. (64)). В то же время амплитуда кулоновского возбуждения также несколько модифицируется, на чем мы здесь не останавливаемся, и обе амплитуды дают когерентный вклад в полное сечение.

§ 23. Функции Грина и интегральные уравнения для стационарных решений рассеяния

Построение § 13 можно легко распространить на случай столкновений сложных систем. С каждым из гамильтонианов H , H_a и т. д. можно связать соответствующую функцию Грина $[E - H \pm ie]^{-1}$, $[E - H_a \pm ie]^{-1}$ и т. д. За исключением нескольких изменений в обозначениях, результаты § 13 остаются справедливыми и в данном случае. Они могут быть получены аналогичным образом, в частности, свойства (85), тождества (88), (89), асимптотические выражения для этих функций. Например, для каждого открытого канала γ имеем (см. ур. (94))

$$\langle \mathbf{r}_\gamma | \frac{1}{E - H \pm ie} | u \rangle \underset{r_\gamma \rightarrow \infty}{\sim} - \frac{M_\gamma}{2\pi\hbar^2} \Phi_\gamma \frac{e^{\pm ik_c r_\gamma}}{r_\gamma} \langle \Psi_{(\gamma, \pm k_c)}^{(\mp)} | u \rangle,$$

$$(k_c = k_c \mathbf{r}_\gamma / r_\gamma).$$

Используя упомянутые свойства функций Грина, можно вывести интегральные уравнения

$$\Psi_a^{(\pm)} = \Phi_a + \frac{1}{E - H_a \pm ie} V_a \Psi_a^{(\pm)}, \quad (138)$$

$$\Psi_a^{(\pm)} = X_a^{(\pm)} + \frac{1}{E - H_a - U_a \pm ie} W_a \Psi_a^{(\pm)}, \quad (139)$$

и т. д., а также формулы

$$\Psi_a^{(\pm)} = \left(1 + \frac{1}{E - H \pm ie} V_a \right) \Phi_a = \quad (140)$$

$$= \left(1 + \frac{1}{E - H \pm ie} W_a \right) X_a^{(\pm)}. \quad (141)$$

Из приведенных интегральных уравнений легко получить борновское разложение для амплитуд переходов. Подставляя в формулу (121) выражение (140) и раскладывая функцию

Грина, получаем

$$\langle b | T | a \rangle = \langle \Phi_b | \left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H + i\epsilon} V_\alpha \right) | \Phi_a \rangle = \quad (142)$$

$$= \langle \Phi_b | \left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H_\alpha + i\epsilon} V_\alpha + \dots \right) | \Phi_a \rangle. \quad (143)$$

В тех частных случаях, которые рассматривались в разделах I и II, амплитуды переходов можно было представить в виде матричных элементов некоторого оператора T , определяемого формулой (101) или одним из интегральных уравнений (102). В случае сложных столкновений нельзя определить один такой оператор. Тем не менее, используя уравнение (142), мы покажем, что любую амплитуду перехода из канала α в канал β при энергии E можно рассматривать как матричный элемент некоторого оператора $T^{\beta\alpha}$, определяемого формулой

$$T^{\beta\alpha} = V_\beta + V_\beta \frac{1}{E - H + i\epsilon} V_\alpha. \quad (144)$$

Отметим, что для столкновений с перераспределением ($V_\beta \neq V_\alpha$) эти матричные элементы не согласуются с обычным определением матричного представления операторов, поскольку векторы $|\Phi_a\rangle$ и $\langle\Phi_b|$, встречающиеся в формуле

$$T_{a \rightarrow b} = \langle \Phi_b | T^{\beta\alpha} | \Phi_a \rangle, \quad (145)$$

не ортогональны.

§ 24. Рассеяние частицы на двух центрах

Основное достоинство формальных построений предыдущего параграфа состоит в том, что они годятся для любых сложных столкновений. Для того чтобы ближе познакомиться с этим формализмом, рассмотрим несложную задачу о рассеянии частицы на двух рассеивающих центрах и получим ряд известных результатов.

Пусть, например, электрон сталкивается с двумя атомами. В дальнейшем мы не будем учитывать обменных эффектов и не станем делать каких-либо предположений о длине волны налетающей частицы.

Ядра атомов будем считать бесконечно тяжелыми, рассматривая их как фиксированные центры. Ядро 1 выберем в качестве начала координат и обозначим R вектор, соединяющий ядра 1 и 2 (см. рис. 18). Предполагается, что расстояние R велико по сравнению с атомными размерами $a \ll R$. Столкнове-

ние описывается гамильтонианом

$$H = H_0 + V, \quad (146)$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + h_1 + h_2, \quad (146')$$

$$V = V_1 + V_2, \quad (146'')$$

где h_1 и h_2 — операторы энергии атомов 1 и 2, а V_1 и V_2 — потенциалы взаимодействия атомов с налетающей частицей. Обозначим свободную функцию Грина G_0

$$G_0 = (E - H_0 + i\epsilon)^{-1}.$$

Матрицу перехода T , связанную с рассеянием частицы (упругим или неупругим) на двух атомах, можно представить в виде борновского разложения

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \dots \quad (147)$$

Заменяя V на $V_1 + V_2$, получаем разложение T по степеням V_1 и V_2

$$\begin{aligned} T = V_1 + V_2 + & V_1 G_0 V_1 + V_1 G_0 V_2 + V_2 G_0 V_1 + V_2 G_0 V_2 + \\ & + V_1 G_0 V_1 G_0 V_1 + V_1 G_0 V_1 G_0 V_2 + \dots \end{aligned}$$

Мы не будем делать каких-либо предположений о величине потенциалов V_1 и V_2 . По этой причине приведенное разложение не обязано быстро сходиться, и в том виде, как оно записано, его нельзя использовать в качестве отправной точки какого-либо приближенного метода. Однако можно так перегруппировать члены этого разложения, что в результате получится быстро сходящееся разложение.

Такая возможность основана на следующем замечании. Рассмотрим матричный элемент члена второго порядка $V_1 G_0 V_2$ в представлении, где диагонален оператор r . Матричный элемент свободной функции Грина G_0 содержит множитель $e^{ik|r-r'|/|r-r'|}$. Поскольку потенциал V_1 сосредоточен в малой окрестности начала координат, а V_2 — в малой окрестности точки R , то упомянутый множитель имеет порядок $1/R$. То же справедливо и для члена $V_2 G_0 V_1$. Грубо говоря, слагаемые $V_1 G_0 V_2$ и $V_2 G_0 V_1$ в a/R раз меньше слагаемых $V_1 G_0 V_1$ и $V_2 G_0 V_2$. Это же замечание относится и к остальным слагаемым. Оно позволяет нам классифицировать различные члены в соответствии с тем, сколько раз G_0 стоит между V_1 и V_2 . Мы будем называть членами первого порядка такие, в которых G_0 ни разу не появляется между V_1 и V_2 , членами второго порядка, — если

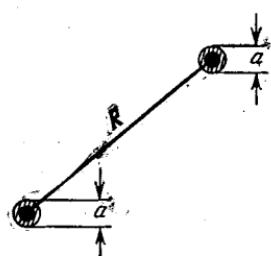


Рис. 18.

G_0 появляется между V_1 и V_2 один раз, ..., членами n -го порядка, — если G_0 появляется $(n - 1)$ раз, и т. д. Согласно этой терминологии $V_1 G_0 V_1$ и $V_2 G_0 V_2$ — члены первого порядка а $V_1 G_0 V_2$, $V_2 G_0 V_1$ — второго порядка.

Введем индивидуальные матрицы перехода T_1 и T_2

$$T_i = V_i + V_i G_0 T_i = V_i + V_i G_0 V_i + V_i G_0 V_i G_0 V_i + \dots \quad (148)$$

$$(i = 1, 2).$$

Матрица перехода T_1 отвечает рассеянию на атоме 1 в предположении, что налетающая частица не взаимодействует со вторым атомом. Аналогичный смысл имеет матрица перехода T_2 . Используя операторы T_1 , T_2 и G_0 , просто записать вклады различных порядков. Искомые выражения определяются путем несложного исследования структуры ряда. Первый порядок дает $T_1 + T_2$, второй порядок $T_1 G_0 T_2 + T_2 G_0 T_1$ и т. д. В результате получаем

$$T = (T_1 + T_2) + (T_1 G_0 T_2 + T_2 G_0 T_1) +$$

$$+ (T_1 G_0 T_2 G_0 T_1 + T_2 G_0 T_1 G_0 T_2) + \dots \quad (149)$$

Разложение (149) является исходной точкой нашего подхода к данной задаче. Легко дать интерпретацию различным членам этого разложения. Члены первого порядка отвечают рассеянию частицы либо на атоме 1 (T_1), либо на атоме 2 (T_2).

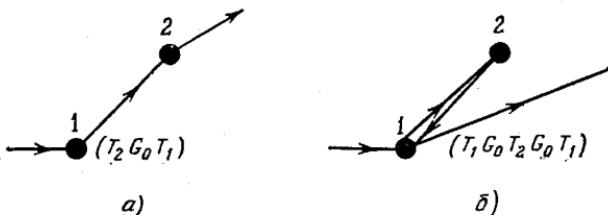


Рис. 19. Графическое изображение членов разложения (149).

Члены второго порядка отвечают двойному рассеянию; так, член $T_1 G_0 T_2$ описывает рассеяние налетающей частицы на атоме 2 (оператор T_2), последующее распространение рассеянной частицы от атома 2 к атому 1 (оператор G_0) и, наконец, рассеяние на атоме 1 (оператор T_1). Точно так же каждый член порядка n описывает n последовательных процессов рассеяния на атомах 1 и 2.

В связи с такой интерпретацией каждый член можно схематически представить диаграммой того же типа, что и в нестационарной теории возмущений (рис. 10). На рис. 19 изображены две такие диаграммы.

Разложение (149) связывает амплитуды переходов при рассеянии на двух центрах с амплитудами переходов при рассеянии на отдельных центрах.

Предположим, для простоты, что атомы тождественны друг другу, и обозначим $t(e)$ матрицу перехода с энергией e при рассеянии на одном центре, т. е. при рассеянии частицы на одном атоме, расположенном в начале координат.

Пусть $|\mathbf{k}mn\rangle$ есть собственный вектор H_0 , который равен произведению волновой функции φ_m атома 1, волновой функции φ_n атома 2 и плоской волны $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, описывающей налетающую частицу с импульсом $\hbar\mathbf{k}$,

$$H_0|\mathbf{k}mn\rangle = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + e_m + e_n\right)|\mathbf{k}mn\rangle.$$

Мы пользуемся нормировкой, при которой

$$\langle \mathbf{k}'m'n' | \mathbf{k}mn \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{mm'} \delta_{nn'}.$$

Точно так же вектор $|\mathbf{k}m\rangle$ равен произведению плоской волны $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ на волновую функцию φ_m атома из задачи с одним рассеивающим центром.

Из определения T_1 (148) легко получить, что

$$\langle \mathbf{k}'m'n' | T_1(E) | \mathbf{k}mn \rangle = \delta_{nn'} \langle \mathbf{k}'m' | t(E - e_n) | \mathbf{k}m \rangle. \quad (150)$$

Аналогичным образом можно найти связь матричных элементов T_2 с элементами матрицы перехода при рассеянии на одном атоме, расположенном в точке R . Такая матрица перехода получается из $t(e)$ общим сдвигом на R и, следовательно (задача 5),

$$\langle \mathbf{k}'m'n' | T_2(E) | \mathbf{k}mn \rangle = \delta_{mm'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')R} \langle \mathbf{k}'n' | t(E - e_m) | \mathbf{k}n \rangle. \quad (151)$$

Формулы (150) и (151) справедливы для любых переходов, в частности, и в том случае, когда энергии состояний $|\mathbf{k}mn\rangle$ и $|\mathbf{k}'m'n'\rangle$ отличны от E .

§ 25. Простое рассеяние. Интерференция

В качестве первого приложения разложения (149) вычислим сечение упругого рассеяния частицы на двух атомах.

Допустим, что атомы находятся до и после рассеяния в основном состоянии φ_0 . Пусть \mathbf{k}_0 и \mathbf{k} — волновые векторы падающей и рассеянной волн. Таким образом, мы рассматриваем переход $(\mathbf{k}_000) \rightarrow (\mathbf{k}00)$ и имеем

$$k = k_0, \quad E = \hbar^2 k^2 / 2m + 2e_0.$$

Чтобы вычислить амплитуду перехода, сохраним в разложении (149) только члены первого порядка

$$T \approx T_1 + T_2. \quad (152)$$

Принимая во внимание соотношения (150) и (151) и вводя обозначения

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}_0,$$

$$\langle \mathbf{k}_0 | t(E - e_0) | \mathbf{k}_0 \rangle \equiv \langle \mathbf{k} | t | \mathbf{k}_0 \rangle,$$

находим

$$\langle \mathbf{k}_0 0 | T | \mathbf{k}_0 00 \rangle \approx [1 + e^{-iqR}] \langle \mathbf{k} | t | \mathbf{k}_0 \rangle. \quad (153)$$

Мы увидим, что это соотношение дает амплитуду рассеяния в рамках элементарной теории интерференции. Соотношение (153) позволяет связать сечение упругого рассеяния на двух атомах $d\Sigma/d\Omega$ с сечением $d\sigma/d\Omega$ такого же упругого рассеяния на одном атоме, т. е. с сечением процесса $(\mathbf{k}_0 0) \rightarrow (\mathbf{k} 0)$. Первое равно квадрату модуля элемента $\langle \mathbf{k}_0 0 | T | \mathbf{k}_0 00 \rangle$, умноженному на соответствующий множитель, а второе сечение равно квадрату модуля $\langle \mathbf{k} | t | \mathbf{k}_0 \rangle$, умноженному на тот же множитель. Из соотношения (153) следует

$$d\Sigma/d\Omega \approx 2I(\Omega) d\sigma/d\Omega, \quad (154)$$

$$I(\Omega) = 1 + \cos(qR). \quad (155)$$

Наличие в формуле (154) множителя $I(\Omega)$ связано с явлением интерференции волн, рассеянных каждым атомом. Не будь интерференции мы имели бы равенство $I(\Omega) = 1$ и сечение $d\Sigma/d\Omega$ было бы просто суммой сечений рассеяния на каждом из атомов 1 и 2.

Мы получим обычные результаты, характерные для интерференции, если исследуем поведение $I(\Omega)$ как функции угла рассеяния. Ограничимся обсуждением только двух предельных случаев, когда длина волны $\lambda = 2\pi/k$ много больше или много меньше R .

Если $\lambda \gg R$, то $qR \ll 1$ независимо от угла рассеяния и $I(\Omega) = 2$. Следовательно, сечение рассеяния на двух атомах в четыре раза больше индивидуального сечения или в два раза больше того ответа, который мы получили бы, если бы не было явления интерференции.

В случае $\lambda \ll R$ функция $I(\Omega)$ при изменении угла рассеяния быстро колеблется между значениями 0 и 2. Пусть углы, образованные векторами \mathbf{k}_0 и \mathbf{k} с вектором \mathbf{R} , равны α_0 и α соответственно. Тогда

$$qR = \frac{2\pi R (\cos \alpha_0 - \cos \alpha)}{\lambda}.$$

Следовательно, $I(\Omega)$ обращается в нуль всякий раз, когда $(\cos \alpha - \cos \alpha_0)$ равно произведению λ/R на полуцелое число,

и равно 2 всякий раз, когда $(\cos \alpha - \cos \alpha_0)$ кратно λ/R . Соответствующие значения α определяют направления минимумов и максимумов интерференции. Ширина интерференционных полос имеет порядок λ/R . Возможность наблюдения этих эффектов зависит от угловой разрешающей способности детектирующей аппаратуры. Последняя регистрирует частицы, рассеянные в некоторый телесный угол с *конечными* размерами $d\Omega \equiv (\delta\alpha)^2$. Полное число регистрируемых частиц равно интегралу от $d\Sigma/d\Omega$ по этой конечной области. Зависимость от углов $d\Sigma/d\Omega$ в этой области в основном определяется множителем $I(\Omega)$. Если $\delta\alpha \gg \lambda/R$, то функция $I(\Omega)$ сильно осциллирует в области интегрирования и ее можно заменить средним значением, не меняя результата, т. е. $I(\Omega) = 1$, и ответ получается такой, как если бы рассеяние на двух атомах было некогерентным¹⁾. Если же $\delta\alpha \ll \lambda/R$, то $I(\Omega)$ практически не меняется в области интегрирования и разрешающая способность детектора достаточна для наблюдения явления интерференции.

Рассмотрим теперь неупругое столкновение, при котором один из атомов переходит из основного состояния в возбужденное. Пусть k_n — волновой вектор рассеянной волны, тогда

$$E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} + e_0 + e_n.$$

Сечение $d\Sigma_n/d\Omega$ есть сумма сечений $d\Sigma_{n0}/d\Omega$ и $d\Sigma_{0n}/d\Omega$, которые соответствуют переходам $(k_000) \rightarrow (k_n n 0)$ и $(k_000) \rightarrow (k_0 n n)$. В приближении (152), когда мы сохраняем в разложении для T только члены, отвечающие простому рассеянию, эти сечения легко вычисляются. При переходе $(k_000) \rightarrow (k_n n 0)$ атом 1 возбуждается, а атом 2 остается в основном состоянии. Вклад от T_2 очевидно обращается в нуль (см. ур. (151)), а вклад от T_1 дает $d\sigma_n/d\Omega$ — сечение процесса $(k_00) \rightarrow (k_n n)$ — неупрогое рассеяния частицы на одном атоме. Переход $(k_000) \rightarrow (k_0 n n)$ отвечает противоположной ситуации: обращается в нуль вклад от T_1 , а вклад от T_2 равен $d\sigma_n/d\Omega$. Окончательно,

$$\frac{d\Sigma_n}{d\Omega} \equiv \frac{d\Sigma_{n0}}{d\Omega} + \frac{d\Sigma_{0n}}{d\Omega} = 2 \frac{d\sigma_n}{d\Omega}.$$

В отличие от упругого рассеяния каждый атом действует так, как если бы он был один в этом процессе: волны, неупрогое рассеянные атомом 1 и атомом 2, отвечают различным каналам и не могут интерферировать.

¹⁾ Этот результат подтверждает и уточняет те условия из § X. 2, при выполнении которых можно считать, что мишень состоит из независимых центров рассеяния.

§ 26. Многократное рассеяние

Рассмотрим процесс $(k_000) \rightarrow (kpq)$, при котором атомы 1 и 2 переходят из основного состояния в возбужденные состояния p и q

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + e_p + e_q.$$

Обозначим сечение этого процесса $d\Sigma_{pq}/d\Omega$.

Поскольку при переходе меняются квантовые состояния обоих атомов, вклад от членов простого рассеяния T_1 и T_2 обращается в нуль и нам следует воспользоваться разложением для T вплоть до второго порядка. Это дает

$$\langle kpq | T | k_000 \rangle \approx A_{12} + A_{21}, \quad (156)$$

где

$$A_{ij} \equiv \langle kpq | T_i G_0 T_j | k_000 \rangle. \quad (157)$$

На рис. 20 изображены диаграммы для этих амплитуд двойного рассеяния.

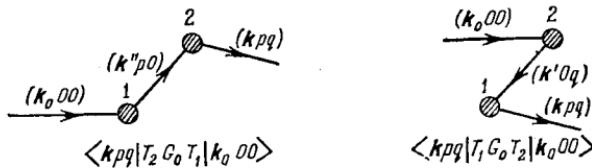


Рис. 20. Диаграммы амплитуд двойного рассеяния.

Вычислим вначале A_{21} . Чтобы воспользоваться условием $a \ll R$, вычисления будем проводить в представлении $\{rmn\}$. Используя коммутативность операторов G_0 , h_1 и h_2 , находим

$$A_{21} = \iint f_2(\mathbf{r}'') g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') f_1(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'' d\mathbf{r}', \quad (158)$$

где

$$f_1(\mathbf{r}') \equiv \langle r' p 0 | T_1 | k_0 00 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \langle \mathbf{k}' p 0 | T_1 | k_0 00 \rangle d\mathbf{k}', \quad (159)$$

$$f_2(\mathbf{r}'') \equiv \langle kpq | T_2 | r'' p 0 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{r}''} \langle kpq | T_2 | \mathbf{k}'' p 0 \rangle d\mathbf{k}'', \quad (160)$$

$$g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \equiv \langle r'' p 0 | G_0 | r' p 0 \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iK_p |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'|}. \quad (161)$$

В последнем выражении положительная величина K_p определяется из уравнения

$$E = \frac{\hbar^2 K_p^2}{2m} + e_p + e_0.$$

Мы будем использовать также вектор \mathbf{K}_p

$$\mathbf{K}_p \equiv \mathbf{K}_p \mathbf{R}/R.$$

В силу свойств оператора T_1 функция $f_1(\mathbf{r}')$ в существенном отлична от нуля только в области с линейными размерами порядка a и центром в начале координат. Аналогичным образом функция $f_2(\mathbf{r}'')$ в существенном отлична от нуля в такой же области, но с центром в точке \mathbf{R} . Следовательно, в интеграле (158) мы можем заменить $g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$ первым членом его разложения по степеням \mathbf{r}'/R и $(\mathbf{r}'' - \mathbf{R})/R$. Возникающая при этом ошибка в вычислении A_{21} имеет порядок a/R . Поскольку

$$|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'| \approx R + \mathbf{R}(\mathbf{r}'' - \mathbf{R} - \mathbf{r}')/R + \dots,$$

имеем

$$g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{K}_p(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}')}}{R}. \quad (162)$$

Подставляя выражения (159), (160) и (162) в правую часть (158) и выполняя интегрирования, находим

$$A_{21} \approx -(m/2\pi\hbar^2 R) \langle \mathbf{k}pq | T_2 | \mathbf{K}_p p0 \rangle \langle \mathbf{K}_p p0 | T_1 | \mathbf{k}_0 00 \rangle. \quad (163)$$

Точно так же, определяя вектор \mathbf{K}_q следующим образом:

$$\mathbf{K}_q \equiv -\mathbf{K}_q \mathbf{R}/R, \quad E = \frac{\hbar^2 K_q^2}{2m} + e_0 + e_q,$$

получаем для A_{12} выражение (с ошибкой порядка a/R)

$$A_{12} \approx -(m/2\pi\hbar^2 R) \langle \mathbf{k}pq | T_1 | \mathbf{K}_q 0q \rangle \langle \mathbf{K}_q 0q | T_2 | \mathbf{k}_0 00 \rangle. \quad (164)$$

Отметим, что стоящие в выражениях (163) и (164) матричные элементы T_1 и T_2 соответствуют переходам, сохраняющим энергию. Воспользовавшись соотношениями (150) и (151), мы можем выразить A_{21} и A_{12} в терминах амплитуд перехода при неупругом рассеянии на одном атоме. То же верно и для сечения процесса $d\Sigma_{pq}/d\Omega$, поскольку

$$\begin{aligned} \frac{d\Sigma_{pq}}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar v_0} | A_{21} + A_{12} |^2 \rho(E) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar v_0} | A_{21} |^2 \rho(E) + \frac{2\pi}{\hbar v_0} | A_{12} |^2 \rho(E) + \frac{2\pi}{\hbar v_0} (A_{21}^* A_{12} + A_{21} A_{12}^*) \rho(E). \end{aligned} \quad (165)$$

Произведя соответствующие вычисления, приходим к следующему результату:

$$\begin{aligned} d\Sigma_{pq}/d\Omega &= (d\sigma_p(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{K}_p)/R^2 d\Omega) (d\sigma_q(\mathbf{K}_p \rightarrow \mathbf{k})/d\Omega) + \\ &\quad + (d\sigma_q(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{K}_p)/R^2 d\Omega) (d\sigma_p(\mathbf{K}_q \rightarrow \mathbf{k})/d\Omega) + \\ &\quad + \text{интерференционные члены.} \end{aligned} \quad (166)$$

Вычисление интерференционных членов мы предоставляем читателю. Символ $d\sigma_n(\mathbf{k} - \mathbf{k}')/d\Omega$ в этом выражении обозначает сечение неупругого рассеяния частицы на атоме $(\mathbf{k}0) \rightarrow (\mathbf{k}'n)$.

Два первых члена в формуле (166) в точности совпадают с теми, которые получаются при элементарном классическом рассмотрении. Рассуждая классически, двукратное рассеяние можно представлять себе двумя способами: либо частица вначале неупрого рассеивается на атоме 1 в направлении атома 2, а затем неупрого рассеивается на атоме 2 в конечном направлении, либо вначале рассеивается на атоме 2 в направлении атома 1, а затем — на атоме 1. Сечения этих двух процессов участвуют в качестве первого и второго слагаемых в выражении (166). К ним следует добавить члены, отвечающие интерференции двух типов рассеянных волн. Относительно этих членов можно сделать те же замечания, что и в § 25. Их наблюдение возможно, если разрешающая способность детектора достаточнона для различия углов, разность которых имеет порядок λ/R .

Если $\lambda \ll a$, то амплитуды рассеяния при отклонениях, превышающих λ/a , практически равны нулю и существенны только сечения рассеяния вперед. Следовательно, как легко видеть из уравнений (163) — (165), двукратное рассеяние возможно только в том случае, когда прямая, на которой расположены атомы, с точностью до λ/a совпадает с направлением движения налетающей частицы, т. е. когда $\mathbf{k}_0 \parallel \mathbf{R}$ или $\mathbf{k}_0 \parallel (-\mathbf{R})$. В первом случае величина A_{12} пренебрежимо мала, а величина A_{21} отлична от нуля при малых отклонениях, т. е. при $\mathbf{k} \parallel \mathbf{k}_0$ с точностью до λ/a частица вначале рассеивается на атоме 1, а затем — на атоме 2 в направлении, почти совпадающим с первоначальным. Во втором случае порядок столкновений противоположный. На этих результатах основано наблюдение «траекторий» ионизованных частиц в камере Вильсона (см. сноска⁷) на стр. 144 тома 1).

Раздел IV. ВЫЧИСЛЕНИЕ АМПЛИТУД ПЕРЕХОДА ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

§ 27. Стационарные выражения сдвигов фаз. Обсуждение

Вариационный метод уже использовался для определения уровней энергии (гл. XVIII). В настоящем разделе мы кратко рассмотрим его применение для вычисления сдвигов фаз и, в более общем случае, амплитуд перехода. Для этого надлежит выразить амплитуды как функционалы от волновых функций задачи рассеяния, которые стационарны по отношению к вариа-