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

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 неупруго рассеивается на атоме 1 в направлении атома 2, а затем неупруго 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 достаточна 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 $\boldsymbol{k}_0\|\boldsymbol{R}$ или $\boldsymbol{k}_0\|(-\boldsymbol{R})$. В первом случае величина A_{12} пренебрежимо мала, а величина A_{21} отлична от нуля при малых отклонениях, т. е. при $\boldsymbol{k}\|\boldsymbol{k}_0$ 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 «траектории» ионизованных частиц в камере Вильсона (см. сноску[7]) 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-

циям функций в окрестности их точного значения. Интегральные выражения для амплитуд перехода, полученные в предыдущем разделе, для этой цели не годятся, поскольку они не стационарны. Например, выражение (54) для T_l, рассматриваемое как функционал от ψ_l, не является стационарным, когда ψ_l — точное решение радиального уравнения; аналогично выражение (127) для $T_{a\to b}$, рассматриваемое как функционал от $\Psi_b^{(-)}$, не является стационарным, когда $\Psi_b^{(-)}$ меняется в окрестности своего точного значения. Было предложено несколько стационарных выражений для амплитуд перехода. Мы приведем здесь выражение, полученное Швингером [1]), которое оказалось наиболее удобным.

В этом параграфе мы рассмотрим случай частицы в центральном потенциале и получим стационарное выражение для коэффициента T_l разложения амплитуды перехода по сферическим функциям (разложение (51)). За исключением нескольких изменений, отмеченных ниже, мы следуем обозначениям § 9.

Если $\psi_a^{(+)}$ — полная стационарная рассеянная волна, то парциальная волна ψ_l удовлетворяет интегральному уравнению (56). Имея в виду дальнейшее обобщение, перепишем последнее в виде

$$\psi_l(r) = j_l(kr) + g_l^{(+)} V \psi_l, \tag{167}$$

где $g_l^{(+)}$ — интегральный оператор, ядром которого является функция Грина

$$g_l^{(+)}(r, r') \equiv -(2mk/\hbar^2)\, j_l(kr_<)\, h_l^{(+)}(kr_>); \tag{168}$$

другими словами

$$g_l^{(+)} V \psi_l \equiv \int_0^\infty g_l^{(+)}(r, r')\, V(r')\, \psi_l(r')\, r'^2\, dr'.$$

Будем также использовать обозначение $\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle$ для скалярного произведения двух радиальных функций φ_1, φ_2

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle \equiv \int_0^\infty \varphi_1^*(r)\, \varphi_2(r)\, r^2\, dr.$$

Тогда интегральную форму (54) для T_l можно переписать в виде

$$T_l = \langle j_l, V\psi_l \rangle. \tag{169}$$

---

[1]) См. цитированную в начале этой главы работу Липпмана и Швингера. Обсуждение относительных преимуществ различных выражений, предложенных для вариационного вычисления сдвигов фаз, имеется в статье *M. Moe, D. S. Saxon.* Phys. Rev. **111**, 950 (1958).

Введем обозначения

$$A[\psi] \equiv \langle j_l, V\psi\rangle = \langle \psi^*, Vj_l\rangle = \int_0^\infty j_l(kr)\, V(r)\, \psi(r)\, r^2\, dr, \tag{170}$$

$$B[\psi] \equiv \langle \psi^*, (V - Vg_l^{(+)}V)\,\psi\rangle = \int_0^\infty \psi^2(r)\, V(r)\, r^2\, dr -$$

$$- \int_0^\infty\!\!\int_0^\infty \left(\psi(r)\, V(r)\, g_l^{(+)}(r, r')\, V(r')\, \psi(r')\right) r^2\, dr\, r'^2\, dr' \tag{171}$$

и рассмотрим функционал

$$\mathcal{T}_l[\psi] \equiv \frac{A^2}{B}, \tag{172}$$

зависящий от функции ψ. Область изменения ψ ограничена только условием локальной интегрируемости функции $r^2|\psi|^2$.

Как очевидное следствие соотношений (167) и (169) имеем

$$\mathcal{T}_l[\psi_l] = T_l.$$

Отметим также, что функционал $\mathcal{T}_l$ *не зависит ни от нормировки функции* ψ (он не меняется при умножении ψ на произвольную постоянную), *ни от значений, которые принимает* ψ *в области, где* $V(r) = 0$. Следовательно, $\mathcal{T}_l$ принимает то же самое значение T_l для любых функций ψ_l, которые удовлетворяют менее жесткому условию, чем уравнение (167).

$$\psi_l(r) = Cj_l(kr) + g_l^{(+)}V\psi_l, \quad \text{если} \quad V(r) \neq 0 \tag{167a}$$

(C — произвольная постоянная).

Вычислим вариацию $\delta\mathcal{T}_l$ как функцию от $\delta\psi$. Согласно определению (172)

$$\delta\mathcal{T}_l = \frac{2A}{B}\,\delta A - \frac{A^2}{B^2}\,\delta B.$$

Вариация δA равна

$$\delta A = \int_0^\infty \delta\psi\, V(r)\, j_l(kr)\, r^2\, dr = \langle \delta\psi^*, Vj_l\rangle,$$

и принимая во внимание, что V вещественно, а $g_l^{(+)}(r, r')$ симметрично по r и r', для вариации δB получаем

$$\delta B = 2\langle \delta\psi^*, (V - Vg_l^{(+)}V)\,\psi\rangle.$$

Следовательно, мы можем записать

$$\delta\mathcal{T}_l = \frac{2A}{B^2}\langle\delta\psi^*, F\rangle,$$

где

$$F(r) = B[\psi]\,V(r)\,j_l(kr) - A[\psi]\,V(r)\left(\psi - g_l^{(+)}V\psi\right).$$

Для того чтобы $\delta\mathcal{T}_l = 0$ при любых $\delta\psi$, необходимо и достаточно, чтобы $F(r) = 0$. Для этого необходимо, чтобы $j_l(kr)$ и $\psi - g_l^{(+)}V\psi$ были пропорциональны друг другу в области, где $V(r)$ отлично от нуля, т. е. чтобы ψ была одной из функций, удовлетворяющих уравнению (167а). Легко показать, что это является также и достаточным условием. Итак, *стационарное значение $\mathcal{T}_l$ равно искомой амплитуде*

$$T_l = \mathcal{T}_l\big|_{\text{st}}. \tag{173}$$

Чтобы в вычислениях участвовали только вещественные функции, мы выделили вещественную и мнимую части $g_l^{(+)}(r, r')$. Вещественная часть будет функцией Грина

$$g_l^{(1)}(r, r') \equiv -(2mk/\hbar^2)\,j_l(kr_<)\,n_l(kr_>),$$

и мы получим

$$g_l^{(+)}(r, r') = g_l^{(1)}(r, r') - i\,(2mk/\hbar^2)\,j_l(kr)\,j_l(kr').$$

Подставляя это выражение в определение $\mathcal{T}_l$ (т. е. в выражение (171) для $B[\psi]$), мы можем переписать (171) в эквивалентной форме

$$T_l^{-1} = \mathcal{T}_l^{-1}\Big|_{\text{st}} = \frac{\left\langle\psi^*, \left(V - Vg_l^{(1)}V\right)\psi\right\rangle}{\langle j_l, V\psi\rangle^2}\Bigg|_{\text{st}} + i\,\frac{2mk}{\hbar^2}$$

и так как из уравнения (52) имеем

$$T_l^{-1} - i\left(2mk/\hbar^2\right) = -2mk\operatorname{ctg}\delta_l/\hbar^2,$$

то получаем следующее стационарное выражение для $k\operatorname{ctg}\delta_l$:

$$k\operatorname{ctg}\delta_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\left\langle\psi^*, \left(V - Vg_l^{(1)}V\right)\psi\right\rangle}{\langle j_l, V\varphi\rangle^2}\Bigg|_{\text{st}} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\int\limits_0^\infty \psi^2 V r^2\,dr - \int\limits_0^\infty\int\limits_0^\infty \left(\psi(r)\,V(r)\,g_l^{(1)}(r, r')\,V(r')\,\psi(r')\right) r^2\,dr r'^2\,dr'}{\left[\int\limits_0^\infty j_l(kr)\,V(r)\,\psi(r)\,r^2\,dr\right]^2}\Bigg|_{\text{st}}. \tag{174}$$

Можно показать, что функцию ψ_l, для которой правая часть уравнения (174) стационарна, можно брать вещественной и что это условие вещественности пробных функций не меняет полученного вариационного свойства.

§ 28. Вариационные вычисления сдвига фаз. Обсуждение

Отправной точкой при вычислении сдвигов фаз вариационным методом служит уравнение (174). Для вычисления функционала в правой части подставляют вместо ψ пробную функцию φ, зависящую от нескольких параметров, и определяют значение получившейся функции, стационарное по отношению к вариации этих параметров. Чем ближе будет пробная функция φ к точному решению ψ, тем ближе будет приближенное значение $k \operatorname{ctg} \delta_l$ к точному значению. Как уже указывалось, и в этом заключается основное достоинство вариационного метода Швингера, результат не зависит от нормировки φ и от значений, которые принимает эта функция в областях, где потенциал V обращается в нуль. Следовательно, для того чтобы этим методом получить близкий к точному ответ, достаточно взять такую пробную функцию, общий вид которой совпадает с формой точного решения в области действия потенциала. Оценка погрешности основана на этих полуколичественных рассмотрениях и является, как и при вариационном вычислении энергетических уровней, в значительной степени эмпирической.

Если мы ограничимся подстановкой в правую часть (174) свободной волны $j_l(kr)$ вместо ψ, то получим

$$k \operatorname{ctg} \delta_l \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1-\Delta_l}{\langle j_l, V j_l \rangle}, \tag{175}$$

где

$$\Delta_l \equiv \frac{\langle j_l, V g_l^{(1)} V j_l \rangle}{\langle j_l, V j_l \rangle}. \tag{176}$$

Эта формула *a priori* точнее формулы борновского приближения (ур. (X.75)). В пределе, когда $\Delta_l \ll 1$, она эквивалентна борновскому приближению второго порядка, в случае же, когда величина Δ_l не мала, эта формула, зачастую, значительно точнее.

Для сравнения этих двух методов рассмотрим рассеяние s-волны прямоугольной ямой в пределе низких энергий. Возьмем

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < r_0, \\ 0 & r > r_0. \end{cases} \tag{177}$$

Будем вычислять длину рассеяния

$$a = -\lim_{k \to 0} (k \operatorname{ctg} \delta)^{-1},$$

используя упомянутые выше методы и сравнивая полученные результаты с точным ответом. Вычисления не представляют труда и, вводя обозначения $b = (2mV_0 r_0^2/\hbar^2)^{\frac{1}{2}}$, результаты можно записать следующим образом:

точный ответ $$a = -\left(\frac{\operatorname{tg} b}{b} - 1\right) r_0,$$

вариационное вычисление ((175)) $$a_{\text{var}} = -\frac{\frac{1}{3} b^2}{1 - \frac{2}{5} b^2} r_0,$$

борновское приближение $$a_B = -\frac{1}{3} b^2 r_0,$$

второе борновское приближение $$a_B^{(2)} = -\left(\frac{1}{3} b^2 + \frac{2}{15} b^4\right) r_0.$$

Критерий применимости борновского приближения выражается неравенством (43), а именно:

$$b \ll 1$$

(b является мерой глубины потенциала, т. е. числа связанных s-состояний). В табл. I приведены численные результаты, соответствующие четырем предыдущим формулам. Отметим, что a_{var} остается хорошим приближением для относительно больших значений b, включая интервал $\frac{1}{2}\pi < b < \pi$, в котором, конечно, борновское приближение не сходится.

§ 29. Распространение метода на сложные столкновения

Предыдущие методы могут быть перенесены на более общие задачи теории рассеяния. Не входя в детали всех возможных расширений, мы ограничимся рассмотрением стационарного выражения для матрицы перехода в случае упругого или неупругого рассеяния двух составных частиц.

Если не оговорено противное, то будем придерживаться обозначений раздела III. Амплитуда перехода $a \to b$ дается равенством

$$T_{a \to b} = \langle \Phi_b | V_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | V_\alpha | \Phi_a \rangle.$$

Таблица I

Сравнение вычисленной различными методами длины рассеяния как функции параметра $b=(2mV_0r_0^2/\hbar^2)^{1/2}$ (r_0 выбрано в качестве единицы длины)

b	Точное вычисление a	Формула стационарности (175) a_{var}	Борновское приближение	
			2-й порядок $a_B^{(2)}$	1-й порядок $a_B^{(1)}$
0	0	0	0	0
$0{,}1\pi$	$-0{,}034$	$-0{,}034$	$-0{,}034$	$-0{,}033$
$0{,}2\pi$	$-0{,}156$	$-0{,}156$	$-0{,}152$	$-0{,}132$
$0{,}3\pi$	$-0{,}460$	$-0{,}459$	$-0{,}401$	$-0{,}296$
$0{,}4\pi$	$-1{,}449$	$-1{,}428$	$-0{,}859$	$-0{,}296$
$\frac{\pi}{2}$	∞ *)	$-63{,}2$ **)	$-1{,}63$	
$0{,}6\pi$	2,63	2,81	$-2{,}9$	
$0{,}7\pi$	1,63	1,72		
$0{,}8\pi$	1,29	1,38		
$0{,}9\pi$	1,11	1,21		
π	1,00	1,12		

*) $a=\infty$ соответствует существованию связанного состояния с нулевой энергией.

**) a_{var} обращается в бесконечность и меняет знак при $b=0{,}503\pi$.

Эти выражения не стационарны по отношению к вариациям $\Psi_a^{(+)}$ или $\Psi_b^{(-)}$. Поскольку мы рассматриваем процесс рассеяния, то невозмущенные гамильтонианы равны, и можно использовать обозначения

$$H_\alpha=H_\beta=H_0,\quad V_\alpha=V_\beta=V,$$

$$G_0^{(+)}=G_0^{(-)\dagger}=[E-H_0+i\varepsilon]^{-1}.$$

Известно, что

$$|\Phi_a\rangle=\left(1-G_0^{(+)}V\right)|\Psi_a^{(+)}\rangle,$$

$$\langle\Phi_b|=\langle\Psi_b^{(-)}|\left(1-VG_0^{(+)}\right).$$

Амплитуда $T_{a\to b}$ дается также выражением

$$T_{a\to b}=\frac{\langle\Psi_b^{(-)}|V|\Phi_a\rangle\langle\Phi_b|V|\Psi_a^{(+)}\rangle}{\langle\Psi_b^{(-)}|\left(V-VG_0^{(+)}V\right)|\Psi_a^{(+)}\rangle}. \tag{178}$$

Это выражение стационарно по отношению к независимым вариациям функций $\Psi_a^{(+)}$ и $\Psi_b^{(-)}$. Оно является обобщением стационарного выражения для T_l, приведенного в § 27.

Исключая простейшие случаи, такие как столкновение двух элементарных частиц, при практическом использовании этого выражения наибольшие трудности связаны с получением явной формы функции Грина $G_0^{(+)}$. Иногда оно может быть использовано в тех рассуждениях, где явная форма $G_0^{(+)}$ не требуется. В любом случае это выражение имеет довольно ограниченную область применения.

Раздел V. ОБЩИЕ СВОЙСТВА МАТРИЦЫ ПЕРЕХОДА

Ряд свойств T-матрицы непосредственно следует из характерных свойств гамильтониана, который описывает столкновение. Некоторые из них уже отмечались в предыдущих разделах, однако не подчеркивалась их большая общность. Систематическое исследование этого вопроса будет проведено в настоящем разделе.

§ 30. Сохранение потока. S-матрица

Некоторые свойства T-матрицы являются простым следствием эрмитовости описывающего рассеяния гамильтониана H. Среди них полученные нами в § 19 интегральные представления (121) и (122). Используя тот же метод, мы получим два новых соотношения, которые называются соотношениями сохранения потока.

Используя обозначения § 19, рассмотрим две стационарных волны $\Psi_a^{(+)}$, $\Psi_b^{(+)}$ отвечающие *одной и той же* энергии E. Имеем

$$\Psi_b^{(+)*}\left(H\Psi_a^{(+)}\right)-\left(H\Psi_b^{(+)}\right)^*\Psi_a^{(+)}=0.$$

Следовательно, величина, которая получается в левой части после суммирования по спинам и интегрирования по конечному объему в конфигурационном пространстве, равна нулю. Применяя теорему Грина, преобразуем эту величину в поверхностный интеграл, который имеет вид суммы членов, относящихся к различным каналам, в пределе, когда поверхность стремится к бесконечности (см. сноску к § 19). Находим

$$\sum_{\nu}\frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to\infty}\left\{\Psi_b^{(+)*},\ \Psi_a^{(+)}\right\}_\nu=0. \tag{179}$$

Сравним левую часть этого уравнения с правой частью уравнения (119). Для вычисления заменим функции $\Psi_b^{(+)}$, $\Psi_a^{(+)}$ их