

ПРИЛОЖЕНИЯ

I. Уравнение Шредингера

1. Уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(r_1, r_2, \dots, t)$ системы частиц имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(r_1, r_2, \dots, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(r_1, r_2, \dots, t)}{\partial t}, \quad (1.1)$$

где $\hat{\mathcal{H}}$ — оператор Гамильтона, t — время, r_1, r_2, \dots — координаты первой, второй и т. д. частиц. Если система находится в состоянии с определенной энергией E , то

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, t) = \Psi(r_1, r_2, \dots) \exp\left(-iE \frac{t}{\hbar}\right), \quad (1.2)$$

и функция Ψ удовлетворяет уравнению

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi. \quad (1.3)$$

Уравнение (1.3), дополненное условиями непрерывности и ограниченности волновой функции Ψ , определяет допустимые собственные энергии и собственные волновые функции системы.

2. Укажем, как можно найти допустимые энергии бесспиновой частицы, движущейся в сферически симметричном потенциале

$$\hat{U}(r) = U(r),$$

где $|r| = r$. Уравнение (1.3) принимает в этом случае вид (см. также гл. I, § 3)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + U(r)\right)\Psi(r) = E\Psi(r)$$

или (в сферических координатах r, ϑ, φ)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \Lambda(\vartheta, \varphi) + U(r)\right)\Psi(r, \vartheta, \varphi) = E\Psi(r, \vartheta, \varphi), \quad (1.4)$$

где оператор

$$\Lambda(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sin \vartheta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (1.5)$$

с точностью до множителя $-\hbar^2$ совпадает с оператором квадрата орбитального момента количества движения. Как известно из курса математической физики, решение уравнения (1.4) следует искать в виде

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{El}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (1.6)$$

где функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ и $R_{El}(r)$ удовлетворяют уравнениям

$$-\Delta Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}, \quad (1.7)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} (rR_{El}(r)) + \frac{2M}{\hbar^2} \left(E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \right) (rR_{El}(r)) = 0. \quad (1.8)$$

Уравнение (1.7) определяет возможные собственные значения квадрата орбитального момента количества движения. В курсах математической физики показывается, что уравнение (1.7) имеет решения только при $l = 0, 1, 2, \dots$ Следовательно, орбитальный момент количества движения также может принимать только целочисленные положительные значения. Уравнение (1.8) при заданном l определяет допустимые значения энергии частицы в потенциале $U(r)$.

Найдем эти энергии в простейшем случае потенциала, имеющего вид «потенциального ящика» с бесконечно высокими стенками (рис. 1.1):

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r > a. \end{cases} \quad (1.9)$$

Ограничимся случаем $l = 0$. Обозначив произведение $rR_{El}(r)$ через $\chi_{El}(r)$, находим, что в области $r < a$ уравнение (1.8) сводится к уравнению

$$\frac{d^2 \chi_{E0}}{dr^2} + \frac{2ME}{\hbar^2} \chi_{E0} = 0. \quad (1.10)$$

Интересующее нас решение этого уравнения должно, во-первых, быть ограниченным и, во-вторых, обращаться в нуль в точке $r = a$, так как частица не может проникнуть в область бесконечно высокого барьера. Удовлетворяющие этим требованиям решения имеют вид

$$\chi_{E0}(r) \sim \sin \left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} r \right), \quad (1.11)$$

где

$$\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} \cdot a = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.12)$$

Из соотношения (1.12) получаем допустимые энергии

$$E_n = (n\pi\hbar)^2 / 2Ma^2. \quad (1.13)$$

«Порядковый номер» n допустимой энергии E_n имеет простой математический смысл: $n - 1$ равняется числу нулей (узлов) радиальной части $R_{Er_0}(r)$ волновой функции в области $0 < r < a$. Как правило, дискретные состояния нумеруются не с помощью энергии E_n , а с помощью главного квантового числа n , которое и пишется вместо E_n в качестве нижнего индекса у функции R .

Как видно из формулы (1.13), энергия частицы растет с увеличением n . Это заключение остается справедливым и при движении частицы в других потенциалах притяжения (см. гл. III, § 4).

3. Рассмотрим теперь уравнение Шредингера для двух частиц с массами M_1 и M_2 , взаимодействующих друг с другом посредством потенциала $U(r_1 - r_2)$.

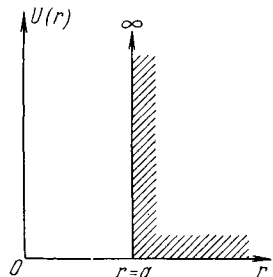


Рис. 1.1. «Потенциальный ящик» с бесконечно высокими стенками.

Уравнение (1.3) в этом случае принимает вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M_1} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{\hbar^2}{2M_2} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (1.14)$$

Для решения этого уравнения целесообразно перейти к переменным

$$\mathbf{R} = \frac{M_1 \mathbf{r}_1 + M_2 \mathbf{r}_2}{M_1 + M_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (1.15)$$

где \mathbf{R} — радиус-вектор центра тяжести двух частиц. В новых переменных уравнение (1.14) записывается следующим образом:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2(M_1 + M_2)} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} - \frac{\hbar^2}{2M_{\text{прив}}} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + U(r) \right) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (1.16)$$

где величина $M_{\text{прив}} = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ носит название *приведенной массы*.

В уравнении (1.16) переменные разделяются. Поэтому его решения можно искать в виде

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = f(\mathbf{R})\varphi(\mathbf{r}), \quad (1.17)$$

где $f(\mathbf{R})$ и $\varphi(\mathbf{r})$ — волновые функции, описывающие соответственно движение центра масс и относительное движение двух частиц. Подставив (1.17) в (1.16), находим уравнения для функций f и φ :

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2(M_1 + M_2)} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} - (E - \varepsilon) \right\} f(\mathbf{R}) = 0, \quad (1.18)$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2M_{\text{прив}}} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + (\varepsilon - U(r)) \right) \varphi(\mathbf{r}) = 0, \quad (1.19)$$

где величина ε имеет смысл энергии относительного движения двух частиц. Таким образом, задача о движении двух взаимодействующих частиц сводится к задаче о независимом движении двух «различных частиц» с массами $M_1 + M_2$ и $M_{\text{прив}}$.

4. В заключение на примере рассеяния бесспиновых частиц силовым центром $U(\mathbf{r})$ рассмотрим амплитуду рассеяния и ее связь с эффективным сечением. Решение $\Psi(\mathbf{r})$ уравнения Шредингера (1.48), описывающее рассеяние частиц на больших расстояниях от рассеивающего центра, должно иметь вид суперпозиции плоской волны $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ налетающих частиц и расходящихся волн $f(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r}$ рассеянных частиц:

$$\Psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r}, \quad (1.20)$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$, $\mathbf{n}' = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$. Величина $f(\mathbf{n}', \mathbf{n})$ называется *амплитудой рассеяния*. Поток налетающих частиц равенется $|e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}|^2 \cdot v = v$, а рассеянных в направлении \mathbf{n}' равен $|f(\mathbf{n}', \mathbf{n})|^2 \left| \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \right|^2 v = |f(\mathbf{n}', \mathbf{n})|^2 \cdot v \cdot \frac{1}{r^2}$ (v — скорость частиц). Соответственно в элемент $d\Omega$ телесного угла в направлении \mathbf{n}' в 1 с будет попадать число dn рассеянных частиц, равное $v \cdot |f(\mathbf{n}', \mathbf{n})|^2 \frac{1}{r^2} \cdot r^2 d\Omega = v |f|^2 d\Omega$.

Согласно (1.53) отсюда следует, что дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega$ рассеяния выражается через амплитуду следующим образом:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dn}{v} = |f(n', n)|^2. \quad (1.21)$$

II. Перевод дифференциальных сечений и энергий из лабораторной системы в систему центра инерции и наоборот

Приведем формулы перевода скоростей, энергий, углов и дифференциальных эффективных сечений из лабораторной системы, т. е. системы, в которой мишень покоится, в СЦИ. Для простоты ограничимся случаем упругого рассеяния нерелятивистской частицы. Пусть M_1, M_2 — массы сталкивающихся частиц, v_0 — скорость налетающей частицы. Скорости частиц в СЦИ до столкновения и после столкновения обозначим соответственно через v_1, v_2 и v'_1, v'_2 :

$$v_1 = \frac{M_2 v_0}{M_1 + M_2}, \quad v_2 = -\frac{M_1 v_0}{M_1 + M_2}, \quad (II.1)$$

$$|v_1| = |v'_1| \quad \text{и} \quad |v_2| = |v'_2|.$$

Соотношение между полярными углами ϑ и ϑ_L вылета рассеянной частицы в СЦИ и в ЛС находится следующим образом. Скорость вылета рассеянной частицы в ЛС

$$v_L = v'_1 + v_c, \quad (II.2)$$

где v_c — скорость системы центра инерции,

$$v_c = \frac{M_1 v_0}{M_1 + M_2}.$$

Спроецировав векторное равенство (II.2) на направление, задаваемое вектором v_c , и перпендикулярное ему направление, находим, что

$$v_L \cos \vartheta_L = v_1 \cos \vartheta + v_c, \quad v_L \sin \vartheta_L = v'_1 \sin \vartheta \quad (II.3)$$

Азимутальные же углы в ЛС и СЦИ, очевидно, равняются друг другу:

$$\varphi_L = \varphi. \quad (II.4)$$

Из уравнений (II.3) получаем, исключая v_L , что

$$\operatorname{tg} \vartheta_L = \frac{\sin \vartheta}{\gamma + \cos \vartheta}, \quad (II.5)$$

где

$$\gamma = \frac{v_c}{v'_1} = \frac{M_1}{M_2}.$$

Заметим, что точно такое же по форме выражение получается и для экзотермической реакции, но γ в этом случае определяется другим равенством:

$$\gamma = \left(\frac{M_1 M'_1}{M_2 M'_2} \cdot \frac{\varepsilon}{\varepsilon + Q} \right)^{1/2}, \quad \text{где} \quad \varepsilon = \frac{M_1 M_2}{2(M_1 + M_2)} v_0^2. \quad (II.6)$$

Здесь M'_1, M'_2 — массы вылетающих частиц, Q — теплота реакции,