МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ имени Д.В. СКОБЕЛЬЦЫНА

В.В. Балашов

Квантовая теория столкновений

МАКС ПРЕСС

МОСКВА – 2012

УДК 530.145.1
ББК 22.31
Б20

Балашов В.В.

Б20 **Квантовая теория столкновений.** – М.: МАКС Пресс, 2012. – 292 с.
ISBN 978-5-317-04143-4

Книга знакомит с методами стационарной и нестационарной нерелятивистской теории столкновений и служит выработки навыков их практического применения в задачах современной физики. Особый упор сделан на методах и представлениях, используемых в теории столкновений с участием составных систем. Материал разбит на лекции, в конце каждой лекции даны упражнения, подобранные так, чтобы студент при условии последовательного усвоения материала мог сделать их самостоятельно. Книга также будет полезна аспирантам и научным работникам, специализирующимся в атомной физике, физике ядра и частиц.

УДК 530.145.1
ББК 22.31

ISBN 978-5-317-04143-4

© МГУ имени М.В. Ломоносова, 2012
© НИИЯФ МГУ, 2012
© Балашов В.В.,2012

30.07.1931 – 28.10.2011

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ КО ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ..... 9

ПРЕДИСЛОВИЕ К ПЕРВОМУ ИЗДАНИЮ..... 11

Раздел I
ПОТЕНЦИАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ

Лекция 1. Стационарная теория потенциального рассеяния. Общие положения.

§ 1.1. Постановка задачи. Интегральное уравнение для волновой функции. Асимптотическое условие..... 13
§ 1.2. Функция Грина свободного движения частицы. Амплитуда рассеяния..... 18
§ 1.3. Связь дифференциального сечения рассеяния с амплитудой рассеяния..... 23
Упражнения..... 25

Лекция 2. **Борновское приближение**.

§ 2.1. Разложение амплитуды рассеяния по кратности взаимодействия. Борновское приближение..... 26
§ 2.2. Об условиях применимости борновского приближения..... 29
§ 2.3. Угловая и энергетическая зависимости рассеяния быстрых частиц на потенциале конечного радиуса..... 31
§ 2.4. Формула Резерфорда. Рассеяние точечного заряда неподвижным протяженным зарядом..... 34
Упражнения..... 38

Лекция 3. Рассеяние на сферически-симметричном потенциале. Разложение по парциальным волнам

§ 3.1. Дифференциальное и интегральное уравнения для радиальных волновых функций..... 39
§ 3.2. Фазы рассеяния..... 44
§ 3.3. Энергетическая зависимость фаз рассеяния при низких энергиях..... 47
§ 3.4. Методы вычисления фаз рассеяния..... 48
Упражнения..... 57

Лекция 4. Рассеяние при низких и при высоких энергиях

§ 4.1. Рассеяние при низких энергиях. Длина рассеяния, обобщенная длина рассеяния, эффективный радиус взаимодействия..... 58
§ 4.2. Рассеяние при высоких энергиях. Эйкональное

приближение..... 66
§ 4.3. Сравнение эйконального и борновского приближений. Условия применимости эйконального приближения..... 71
Упражнения..... 73

Лекция 5. Кулоновское рассеяние
§ 5.1. Особенности задачи о кулоновском рассеянии..... 74
§ 5.2. Решение задачи о кулоновском рассеянии в параболических координатах..... 79
§ 5.3. Рассеяние на потенциале с кулоновской асимптотикой..... 82
Упражнения..... 85

Лекция 6. Дополнительные вопросы теории потенциального рассеяния
§ 6.1. Функция Грина частицы, движущейся в поле силового центра..... 85
§ 6.2. Оператор перехода (t-оператор)..... 89
§ 6.3. Решение уравнения Липпмана—Швингера для t-оператора. Случай сепарабельного взаимодействия..... 92
§ 6.4. Об аналитических свойствах t-матрицы..... 94
§ 6.5. Эйкональное приближение для функции Грина свободной частицы..... 95
Упражнения..... 97

Лекция 7. Нестационарная теория столкновений
§ 7.1. Столкновения при одномерном движении..... 98
§ 7.2. Рассеяние трехмерных волновых пакетов. Асимптотические состояния. Оператор рассеяния..... 105
§ 7.3. Свойства S-оператора. Связь S-оператора с t-оператором..... 108
§ 7.4. Дифференциальное сечение потенциального рассеяния в нестационарной теории..... 113
Упражнения..... 117

Раздел II
МНОГОЧАСТИЧНАЯ ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ

Лекция 8. Упругое и неупругое рассеяния частиц на составной системе в борновском приближении
§ 8.1. Борновское приближение как первый порядок теории возмущений. Дифференциальные сечения

упругого и неупругого рассеяний..... 119
§ 8.2. Упругое рассеяние быстрых электронов на атомах..... 124
§ 8.3. Возбуждение дискретных уровней атомов быстрыми электронами. Понятие неупругого формфактора. Правила отбора при малом передаваемом импульсе. Энергетическая зависимость вероятности оптически разрешенных переходов..... 127
§ 8.4. Плотность перехода. Связь между неупругими формфакторами и переходными плотностями..... 134
Упражнения..... 136

Лекция 9. Правила сумм в теории столкновений. Приближение полноты
§ 9.1. Роль правил сумм в атомной и ядерной физике. «Динамические» правила сумм в теории столкновений..... 138
§ 9.2. Некогерентное рассеяние быстрых электронов на атомах. Связь вероятности рассеяния с парной корреляционной функцией..... 143
§ 9.3. Средняя энергия, теряемая частицей при некогерентном рассеянии. Понятие квазисвободного взаимодействия..... 147
Упражнения..... 149

Лекция 10. Основные понятия многоканальной теории рассеяния
§ 10.1. Уравнения метода сильной связи каналов. Асимптотические условия..... 150
§ 10.2. Задача о двух связанных каналах..... 155
§ 10.3. Вероятность упругого и неупругого рассеяний: *S*-матрица..... 158
§ 10.4. Понятие обобщенного оптического потенциала. Оптическая модель упругого рассеяния..... 163
Упражнения..... 169

Лекция 11. Оптический потенциал в теории неупругого рассеяния. Метод искаженных волн
§ 11.1. Приближение искаженных волн..... 170
§ 11.2. Метод искаженных волн и оптическая модель..... 173
§ 11.3. Метод искаженных волн при высоких энергиях..... 179
Упражнения..... 182

Лекция 12. **Резонансное рассеяние**
§ 12.1. Резонансы в задаче о двух связанных каналах..... 182

§ 12.2. Резонансы в рассеянии и распадающиеся состояния ... 189
§ 12.3. Признаки резонанса ... 192
§ 12.4. Резонансный механизм расщепления составных систем ... 194
Упражнения ... 198

Лекция 13. Многочастичная теория столкновений в t-матричной формулировке
§ 13.1. Метод Кермана—Мак-Мануса —Талера ... 199
§ 13.2. Двухчастичная t-матрица и оптический потенциал ... 205
§ 13.3. Импульсное приближение ... 207
§ 13.4. Столкновения в системе трех частиц. Уравнения Фаддеева ... 208
Упражнения ... 212

Лекция 14. Медленные столкновения
§ 14.1. Поляризационный потенциал атомов ... 214
§ 14.2. Взаимодействие между нейтральными атомами ... 217
§ 14.3. Перезарядка атомов при медленных соударениях. Понятие квазимолекулярных термов ... 218
§ 14.4. Кулоновское возбуждение ядер ... 226
Упражнения ... 228

Лекция 15. Дифракционное рассеяние
§ 15.1. Рассеяние на абсолютно черной сфере ... 228
§ 15.2. Модель Глаубера — Ситенко ... 231
§ 15.3. Неупругое и квазиупругое (некогерентное) рассеяния ... 238
§ 15.4. Неупругое рассеяние в пределе очень сильного поглощения ... 245
§ 15.5. Многоканальная теория дифракционного рассеяния ... 247
Упражнения ... 250

Раздел III
ВОПРОСЫ СИММЕТРИИ, УНИТАРНОСТИ И АНАЛИТИЧНОСТИ

Лекция 16. Унитарность S-матрицы. Дисперсионные соотношения. Связь сечений прямых и обратных процессов
§ 16.1. Унитарность S-матрицы и ее следствия ... 252
§ 16.2. Дисперсионные соотношения ... 260

§ 16.3. Обращение времени. Связь сечений прямого и обратного процессов при столкновении..... 263
Упражнения..... 269

Лекция 17. Эффекты взаимодействий, зависящих от спина. Тождественность частиц
§ 17.1. Инвариантные свойства амплитуды рассеяния частиц со спином. Поляризация частиц при рассеянии..... 270
§ 17.2. Рассмотрение поляризационных явлений на основе аппарата спиновой матрицы плотности..... 275
§ 17.3. Рассеяние тождественных частиц..... 280
§ 17.4. Эффекты тождественности частиц при столкновении составных систем..... 284
Упражнения..... 287

ЛИТЕРАТУРА..... 289

ПРЕДИСЛОВИЕ КО ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ

Настоящее издание посвящено памяти выдающегося физика – теоретика, профессора физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова, заведующего кафедрой физики атомного ядра (с 1991 по 2007 г.г., в 1998 г. – переименована в кафедру физики атомного ядра и квантовой теории столкновений) Всеволода Вячеславовича Балашова (30.07.1931 – 28.10.2011). На физическом факультете МГУ Всеволодом Вячеславовичем были созданы и прочитаны общий курс лекций "Квантовая механика", курсы "Структура ядер", "Ядерные реакции", "Физика гиперядер", “Строение вещества”, "Матрица плотности", "Квантовая теория столкновений" и др. Также по его инициативе на физическом факультете был создан уникальный теоретический практикум по ядерной и атомной физике.

"Квантовой теории столкновений" Всеволод Вячеславович отводил особое место в ряду разработанных им курсов. В течение многих лет он читал его в осеннем семестре студентам 4 курса кафедры физики атомного ядра и квантовой теории столкновений. Данный курс лекций, представляющий собой развернутое и углубленное изложение одного из основных разделов квантовой механики, Всеволод Вячеславович рассматривал как базовый при подготовке специалистов в области физики ядра и частиц. В частности, без «Квантовой теории столкновений» невозможно представить обучение будущих физиков, не только теоретиков, но и экспериментаторов, планирующих заниматься физикой ядерных реакций. Изначально курс был задуман и создан Всеволодом Вячеславовичем как односеместровый, в котором излагается нерелятивистская квантовая теория как потенциального, так и многоканального рассеяния. Однако в последние годы жизни Всеволод Вячеславович расширил свой курс лекций до

двухсеместрового, читаемого студентам параллельно с общим курсом квантовой механики на физическом факультете МГУ. К сожалению, Всеволод Вячеславович не успел претворить в жизнь целый ряд других, задуманных им модификаций, расширений и дополнений своего курса. Последние включали элементы релятивистской квантовой теории столкновений, тесную корреляцию материала лекций с другими базовыми курсами ядерного отделения физического факультета МГУ, и многое другое. Тем не менее, даже без учета этих планировавшихся изменений, курс «Квантовая теория столкновений», разработанный Всеволодом Вячеславовичем около 30 лет назад, нисколько не устарел в контексте современных исследований по физике ядра и частиц, а также атомной физике, и по праву может считаться одним из лучших учебных курсов в своей области.

Книга "Квантовая теория столкновений", созданная на основе этого курса, впервые была издана в 1985 г. и быстро стала библиографической редкостью. В настоящем издании, подготовленном уже без участия Всеволода Вячеславовича, исправлен ряд неточностей и опечаток, допущенных в первом издании. При его подготовке неоценимую помощь оказали студенты кафедры физики атомного ядра и квантовой теории столкновений Анна Щербакова, Игорь Эльперин, Татьяна Власова, Яна Захарова, Яна Лежнина, Вячеслав Шакура и Василий Тивков.

Грум-Гржимайло А.Н., Еременко Д.О.,
Кузаков К.А., Никитин Н.В., Новиков Н.В.,
Платонов С.Ю., Саврин В.И., Стысин А.В.

ПРЕДИСЛОВИЕ К ПЕРВОМУ ИЗДАНИЮ

Нерелятивистская квантовая теория столкновений входит в современные университетские курсы квантовой механики в качестве одного из самых крупных ее разделов. В предлагаемой книге дается расширенное изложение этого раздела, рассчитанное на студентов-физиков (в основном будущих экспериментаторов), специализирующихся по ядерной физике, физике элементарных частиц и атомной физике. В основу книги положены лекции, которые читались автором на отделении ядерной физики физического факультета МГУ в VIII семестре 1981/82 и 1982/83 учебных годов.

По характеру своего построения книга близка к учебному пособию В.В.Балашова и В.К.Долинова «Курс квантовой механики» (Изд-во МГУ, 1982) и при последовательном изучении квантовой механики может использоваться сразу за ним. Она, однако, не заменяет второй части этого пособия, куда помимо теории столкновений должны войти и другие важные разделы.

Курс, рассчитанный на один семестр, конечно, не может дать студенту всех сведений о современной квантовой теории столкновений. Работая над книгой, автор ставил перед собой две главные цели: 1) дать читателю пусть начальное, но цельное представление о квантовой теории столкновений как о совокупности тесно связанных между собой теоретических методов, вынести на первый план (иногда даже за счет формальной строгости) физический смысл и самих методов, и получаемых с их помощью результатов; 2) подвести студента к практическому использованию излагаемых методов. Этому служат, в частности, упражнения к каждой лекции, подобранные так, чтобы студент, проработавший теоретический материал лекции, мог выполнить их самостоятельно.

Что касается объема предлагаемого читателю материала, то автор стремился к минимуму, отбирая лишь

самое необходимое, что действительно можно хорошо и без пропусков освоить в рамках семестрового курса. Содержание первого раздела ("Потенциальное рассеяние") значительно перекрывается с его традиционным изложением в общих курсах квантовой механики; соответствующий материал дан конспективно. В остальной части основное внимание обращается на такие методы современной теории столкновений, которые на практике используются широко, а излагаются лишь в специальной литературе, причем обычно в отрыве друг от друга.

Автор глубоко благодарен В.Г.Зелевинскому и В.К.Лукьянову за ценные замечания, сделанные при рецензировании рукописи, и Н.Д.Долаберидзе за большую работу по подготовке рукописи к печати.

В.В.Балашов
1984 г.

Раздел I

ПОТЕНЦИАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ

Лекция 1. Стационарная теория потенциального рассеяния. Общие положения

§ 1.1. Постановка задачи. Интегральное уравнение для волновой функции. Асимптотическое условие

Методы современной квантовой теории столкновений принято разделять на две категории — *стационарные и нестационарные*.

Внешнее различие между этими двумя подходами велико. Оно касается и того, как формулируется задача, и математического аппарата и, наконец, области непосредственного практического применения. В первом случае она очень широка и включает разнообразные задачи, относящиеся к столкновениям атомных частиц, ядерным реакциям, взаимодействию элементарных частиц. Во втором случае область практического применения теории гораздо уже. Нестационарная теория столкновений используется чаще всего при решении особых задач, связанных с трактовкой специально поставленных экспериментов. Кроме того, в отличие от стационарной теории здесь по существу нет таких стандартных теоретических приемов, которые были бы взяты «на вооружение» непосредственно экспериментаторами.

Тем не менее, между стационарной и нестационарной теориями столкновений нет принципиальных различий, а, следовательно, и какого-либо принципиального разделения сфер их действия. Мы покажем, что стационарная теория столкновений со всеми ее привычными атрибутами — фазами рассеяния, борновским приближением, формфакторами и т.п. — вытекает из строгой формулировки задачи столкновения, которая в квантовой механике, как и в классической механике,

дается изначально в рамках нестационарной теории. Другими словами, стационарная теория столкновений — это особый математический метод, «рецепт» решения задач теории столкновений, который технически очень удобен и физически нагляден. Вместе с тем надо учитывать и то, что современная квантовая физика все чаще сталкивается с задачами, где видна потребность в разработке других, «прямых» методов нестационарной теории, позволяющих непосредственно проследить за эволюцией состояний квантовых систем в процессах столкновений.

Мы построим изложение следующим образом. Сначала, отправляясь от интуитивных соображений, сформулируем основные положения стационарной теории столкновений — сперва применительно к задаче потенциального рассеяния, а затем и к разнообразным задачам о столкновениях с составными системами. По ходу разработки конкретных методов теории мы будем не только демонстрировать их успешное применение, но и останавливаться на трудностях, условностях стационарной теории. В заключительной лекции первого раздела курса будет сделано «сшивание» стационарного и нестационарного подходов.

Начнем с простейшей задачи о рассеянии частиц неподвижным силовым центром. Пусть $V(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц с центром, μ — масса частицы. Наша цель — найти дифференциальное сечение рассеяния $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ при условии, что на центр из бесконечности падает плоскопараллельный пучок частиц с заданной начальной скоростью $\mathbf{v}_0 = \mathbf{n}_0 v_0$.

Вспомним, как решается эта задача в классической механике. При $t = -\infty$ для каждой частицы падающего пучка задается прицельный параметр $\mathbf{b}$. В общем случае это двумерный вектор в плоскости, перпендикулярной направлению $\mathbf{n}_0$. При рассеянии сферически-симмет-

ричным или аксиально-симметричным (относительно направления падающих частиц) потенциалом задача характеризуется аксиальной симметрией; в таком случае достаточно указать модуль вектора $\mathrm{b} = |\mathbf{b}|$. Уравнения движения позволяют найти для каждого значения $\mathbf{b}$ траекторию движения частиц: $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$. Ее асимптотика при $t \to +\infty$ указывает направление вылета рассеянной частицы $\mathbf{n}$, т.е. в общем случае, полярный θ и азимутальный φ углы рассеяния. Установив зависимость $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{b})$, мы вычисляем дифференциальное сечение рассеяния $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$.

В квантовой механике нет траекторий движения частиц. Процесс рассеяния описывается волновой функцией, которая при использовании стационарной теории столкновений есть решение стационарного уравнения Шредингера:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad . \tag{1.1}$$

В рассматриваемой задаче $\mathbf{r}$ — это пространственная координата частицы, а гамильтониан $\hat{H}$ — оператор, представляющий собой сумму оператора кинетической энергии частицы $\hat{H}_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2$ и потенциальной энергии ее взаимодействия с силовым центром $\hat{V} = V(\mathbf{r})$:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad . \tag{1.2}$$

Все взаимодействия, с которыми мы будем иметь дело, исчезают на больших расстояниях от силового центра. Примем уровень потенциальной энергии на бесконечности за начало отсчета полной и потенциальной энергии частицы:

$$V|_{r\to\infty} = 0 \quad . \tag{1.3}$$

Таким образом, область, в которой $V(\mathbf{r}) > 0$, соответствует отталкиванию, а $V(\mathbf{r}) < 0$ — притяжению частицы силовым центром.

При $E > 0$ уравнение (1.1) не имеет квадратично интегрируемых решений. Вместе с тем важнейшим исходным положением квантовой механики является положение о том, что только квадратично интегрируемые функции описывают реальные состояния физических систем (см. [1, с.6]). Таким образом, решения стационарного уравнения Шредингера, с которыми имеет дело стационарная теория столкновений, играют с физической точки зрения лишь вспомогательную роль, и их связь с реальными состояниями частицы, испытывающей столкновение, нам еще предстоит выяснить (см. лекцию 7).

Подставляя (1.2) в (1.1), перепишем уравнение Шредингера в виде

$$(\widehat{H}_0 - E)\,\psi(\mathbf{r}) = -\widehat{V}\,\psi(\mathbf{r}) \quad . \qquad (1.4)$$

Вместе с этим уравнением нам придется рассматривать и соответствующее однородное уравнение, решения которого мы будем обозначать как $\varphi(\mathbf{r})$:

$$(\widehat{H}_0 - E)\,\varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad . \qquad (1.5)$$

Частным случаем решения $\varphi(\mathbf{r})$ является плоская волна:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} \quad . \qquad (1.6)$$

Не будучи квадратично интегрируемой, функция (1.6) не описывает какого-либо реального состояния частицы; в стационарной теории столкновений мы будем пользоваться ею для описания плоскопараллельного стационарного потока частиц с заданным импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ (в дальнейшем мы будем просто говорить – «с импульсом $\mathbf{k}$»). Заметим, что при выбранной нами нормировке функции (1.6) удовлетворяют следующему соотношению («условие полноты»):

$$\int \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\varphi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r})\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\ . \qquad (1.7)$$

Будем искать решение уравнения (1.4), описывающее процесс рассеяния, исходя из следующего *физического требования:* пусть на достаточно большом расстоянии от силового центра, когда взаимодействием между частицей и силовым центром можно пренебречь, волновая функция задачи рассеяния представляет собой суперпозицию плоской волны (1.6) и расходящейся сферической волны:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|_{\mathrm{r}\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \text{расх. волна}\ , \qquad (1.8)$$

где $\mathbf{k}$ — импульс (волновой вектор) падающих частиц. Ниже мы покажем, что такое решение уравнения (1.4) действительно существует.

Для этого перейдем от дифференциального уравнения Шредингера (1.4) к эквивалентному интегральному уравнению

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \int G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\,V(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\,\mathrm{d}^3\mathrm{r}'\ , \qquad (1.9)$$

где $G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ — функция Грина, соответствующая оператору $\widehat{H}_0$ и удовлетворяющая уравнению

$$(E-\widehat{H}_0)\,G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (1.10)$$

(мы будем называть $G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ **функцией Грина свободного движения частицы**). В эквивалентности (1.4) и (1.9) легко убедиться, подставив (1.9) в левую часть уравнения (1.4). При этом надо учесть связь между энергией и импульсом свободной частицы:

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\ . \qquad (1.11)$$

В дальнейшем мы будем пользоваться также сокращенной записью уравнения (1.9):

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \frac{1}{(E - \hat{H}_0)} \hat{V}\, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \ , \qquad (1.12)$$

или

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \hat{G}_0(E)\, \hat{V}\, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \ , \qquad (1.13)$$

где

$$\hat{G}_0(E) \equiv \frac{1}{(E - \hat{H}_0)}$$

— гриновский оператор свободного движения частицы (являющийся, как видно из (1.9), интегральным оператором).

Интегральные уравнения (1.9), (1.13) для волновой функции задачи рассеяния носят название **уравнения Липпмана—Швингера**.

Из всех возможных решений уравнения Липпмана — Швингера нам надо выбрать такие, которые удовлетворяют асимптотическому условию (1.8). Как это сделать? Для ответа на этот вопрос вычислим функцию Грина $G_0(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и рассмотрим, как выглядит она при $r \to \infty$.

§ 1.2. Функция Грина свободного движения частицы. Амплитуда рассеяния

Легко убедиться в том, что если $G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — функция Грина, соответствующая оператору $\hat{H}$, а $\{\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})\}_{\mathrm{n}=1}^{\infty}$ – полный набор ортонормированных собственных функций этого оператора:

$$\hat{H}\varphi_{\mathrm{n}} = E\varphi_{\mathrm{n}} \quad , \qquad \mathrm{n} = 1,2, \dots, \infty, \qquad (1.14)$$

то справедливо так называемое **спектральное разложение**, или **спектральное представление функции Грина**:

$$G(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{\mathrm{n}=1}^{\infty} \frac{\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})\varphi_{\mathrm{n}}^{*}(\mathbf{r}')}{E - E_{\mathrm{n}}} \quad . \qquad (1.15)$$

Действительно, подействовав на $G(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ оператором $\left(E - \widehat{H}\right)$ и учитывая свойство полноты функций $\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})$, приходим к уравнению типа (1.10):

$$\left(E - \widehat{H}\right)G(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \left(E - \widehat{H}\right)\sum_{\mathrm{n}=1}^{\infty} \frac{\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})\varphi_{\mathrm{n}}^{*}(\mathbf{r}')}{E - E_{\mathrm{n}}} =$$

$$= \sum_{\mathrm{n}} \varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})\varphi_{\mathrm{n}}^{*}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad , \qquad (1.16)$$

где оператор $\widehat{H}$ действует на переменную $\mathbf{r}$; это уравнение определяет функцию Грина, соответствующую оператору $\widehat{H}$.

Воспользуемся спектральным представлением (1.15) для вычисления функции Грина свободной частицы $G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$. Правда, в нашем случае спектр собственных значений (или, если говорить более строго, обобщенных собственных значений) оператора $\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2$ — непрерывный, и сумму в (1.15) надо заменить интегралом:

$$G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int \frac{\varphi_{\chi}(\mathbf{r})\varphi_{\chi}^{*}(\mathbf{r}')}{E - \frac{(\hbar\chi)^2}{2\mu}} \frac{\mathrm{d}^3\chi}{(2\pi)^3} \quad ; \qquad (1.17)$$

здесь $\varphi_{\boldsymbol{\chi}}(\mathbf{r})$ — плоская волна (1.6) описывающая свободное движение частицы с импульсом $\boldsymbol{\chi}$. Выполняя несложные преобразования, связанные, в частности, с интегрированием по направлениям вектора $\boldsymbol{\chi}$, приходим к выражению

$$G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{\mu}{2\pi^2\hbar^2}\,\frac{1}{i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{i\chi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\chi^2}\,\chi d\chi\ . \quad (1.18)$$

Здесь становится видно, что уравнение (1.10) и соответствующее ему спектральное представление (1.17) не определяют функции Грина $G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ однозначно. Мы можем сами распорядиться способом обхода полюсов в интеграле (1.18), чтобы получить нужную нам функцию Грина $G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$, такую, которая при подстановке в уравнение Липпмана — Швингера (1.9) обеспечит требуемое соотношением (1.8) асимптотическое поведение волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

Рассмотрим два способа обхода полюсов: добавим к положительной вещественной величине E, входящей в (1.18), малую добавку $\pm i\varepsilon$, а после вычисления интеграла обратим ε в нуль; соответствующие выражения для функции Грина $G_0(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ снабдим индексом $(+)$ или $(-)$:

$$G_0^{(\pm)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \lim_{\varepsilon\to+0} G_0(E\pm i\varepsilon,\mathbf{r},\mathbf{r}')\ . \quad (1.19)$$

В соответствии с (1.19) определим также два гриновских оператора $\hat{G}_0^{(+)}(E)$, $\hat{G}_0^{(-)}(E)$:

$$\hat{G}_0^{(\pm)}(E) = \left.\frac{1}{E\pm i\varepsilon-\hat{H}_0}\right|_{\varepsilon\to+0}\ . \quad (1.20)$$

Непосредственное (с помощью техники вычетов) вычисление интегралов (1.19) дает

$$\hat{G}_0^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\ , \quad (1.21)$$

$$\hat{G}_0^{(-)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\ . \quad (1.22)$$

Покажем, что подстановка в уравнение (1.9) функции Грина $G_0^{(+)}$ обеспечивает выполнение асимптотического условия (1.8). Для этого заметим, что при $\mathrm{r} \gg \mathrm{r}'$функция Грина $G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ имеет вид

$$G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\Big|_{r \gg r'} \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \quad , \qquad (1.23)$$

здесь мы воспользовались разложением

$$|\,\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = |\mathbf{r}| - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r} + \cdots \qquad (1.24)$$

и ввели новое обозначение

$$\mathbf{k}' = k\,\frac{\mathbf{r}}{r} \quad . \qquad (1.25)$$

Вектор $\mathbf{k}'$ равен по модулю импульсу падающих частиц $\mathbf{k}$ и направлен в точку наблюдения; таким образом, $\mathbf{k}'$ — это импульс частицы, рассеянной в направлении единичного вектора $\mathbf{r}/r$.

Прежде чем подставить функцию Грина $G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в (1.9) условимся об одном важном ограничении, касающемся потенциала взаимодействия $V(\mathbf{r})$. Именно — ограничимся так называемыми **потенциалами конечного радиуса**: для каждого из них можно указать такое расстояние от центра d, за пределами которого взаимодействие частиц с силовым центром пренебрежимо мало (мы будем говорить также, что радиус d разделяет «внутреннюю» и «внешнюю» области действия силового центра). К классу потенциалов конечного радиуса относятся такие часто используемые потенциалы, как потенциал прямоугольной формы:

$$V(r) = \begin{cases} V_0, & r \le d \\ 0, & r > d \end{cases} \; ; \qquad (1.26)$$

потенциал Юкавы:

$$V(r) = A\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r} \qquad (1.27)$$

(ту же форму имеет экранированный кулоновский потенциал); гауссов потенциал:

$$V(r) = V_0\,\mathrm{e}^{-(r/b)^2}\ ; \qquad (1.28)$$

потенциал Вудса — Саксона:

$$V(r) = V_0\frac{1}{1+\exp\left\{\dfrac{r-\mathrm{R}}{a}\right\}}\ . \qquad (1.29)$$

Важнейший пример потенциала, не являющегося потенциалом конечного радиуса, — кулоновский потенциал:

$$V_c(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\ ; \qquad (1.30)$$

а также любой потенциал с кулоновским поведением на больших расстояниях (с кулоновским «хвостом»)*.

Итак, пусть в рассматриваемой нами задаче $V(\mathbf{r})$ — это потенциал конечного радиуса. Обратимся к уравнению (1.9). Интеграл в правой части берется фактически по области конечных размеров – порядка d. Поэтому при $r \gg d$ можно подставить в (1.9) приближенное выражение функции Грина (1.23). В итоге получаем

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|_{r\gg d} \approx \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} - \\ -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r'\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\ . \qquad (1.31)$$

---

* В § 5.1 мы увидим, что с математической точки зрения при определении характера короткодействия потенциала является важным, спадает ли потенциал на больших расстояниях быстрее или медленнее, чем $1/r^2$.

Мы убедились в том, что использование в уравнении Липпмана — Швингера функции Грина (1.21) обеспечивает требуемое соотношением (1.8) асимптотическое поведение волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (плоская плюс расходящаяся волны). Будем обозначать такое решение уравнения (1.9) символом $\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r})$ а само уравнение перепишем в виде

$$\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \int G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\, V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}')\, \mathrm{d}^3 r' \ , \quad (1.32)$$

где, в отличие от (1.9), явно указано, что в него входит функция Грина (1.21). Асимптотика волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r})$ имеет, согласно (1.31), вид

$$\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \ , \quad (1.33)$$

где

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\, V(\mathbf{r})\, \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}^3 r \ . \quad (1.34)$$

Квадрат модуля величины $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ определяет, на больших расстояниях от силового центра, интенсивность расходящейся волны e^{ikr}/r относительно падающей волны $\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}$. Будем называть $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ **амплитудой рассеяния**.

§ 1.3. Связь дифференциального сечения рассеяния с амплитудой рассеяния

Элемент эффективного сечения рассеяния $\mathrm{d}\sigma$, соответствующий телесному углу $\mathrm{d}\Omega$, есть, по определению, число частиц, которые в результате рассеяния попадают в этот телесный угол в единицу времени, отнесенное к плотности потока падающих частиц:

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{\mathrm{d}n}{j_{\mathrm{in}}} \ . \quad (1.35)$$

На первый взгляд, нет никаких проблем в том, чтобы, зная асимптотику волновой функции задачи рассеяния (1.33) и пользуясь известной формулой для плотности тока вероятности

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2\mu}(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*) \ , \qquad (1.36)$$

найти числитель и знаменатель этого выражения. Действительно, число частиц $\mathrm{d}n$ есть радиальная составляющая плотности потока рассеянных частиц $\mathrm{j}_{\mathrm{out}}$, умноженная на соответствующую площадь поверхности:

$$\mathrm{d}n = \mathrm{j}_{\mathrm{out}} r^2 \mathrm{d}\Omega \ . \qquad (1.37)$$

Считая, что составляющая $\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}$ в асимптотической волновой функции (1.33) определяет плотность падающего потока j_{in}, а составляющая $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})\left(\mathrm{e}^{ikr}/r\right)$ — плотность рассеянного потока $\mathrm{j}_{\mathrm{out}}$, мы по формуле (1.36) получаем:

$$\mathrm{d}n = \frac{\hbar \mathrm{k}}{\mu}|f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \mathrm{d}\Omega \ , \qquad (1.38)$$

$$\mathbf{j}_{\mathrm{in}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{\mu} \ . \qquad (1.39)$$

Отсюда следует

$$\mathrm{d}\sigma = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \mathrm{d}\Omega \qquad (1.40)$$

или — иначе — для дифференциального сечения:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \ . \qquad (1.41)$$

Итак, квадрат модуля амплитуды рассеяния — это дифференциальное сечение рассеяния.

Надо обратить внимание на то, что наш вывод формулы (1.41) был формальным. Плотность тока вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ — это квадратичная форма относительно волновой функции. Подставляя в (1.36) всю комбинацию

(1.33), можно выделить в $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ то, что мы назвали плотностью падающего потока $\mathbf{j}_{\text{in}}$ и плотностью рассеянных частиц $\mathbf{j}_{\text{out}}$. Но ведь остается еще и интерференционное слагаемое! Каков его физический смысл? Почему мы его отбросили?

Мы отложим разбор этих вопросов, а вместе с ним и последовательный вывод формулы (1.41) до лекции 6.

Упражнения

1.1. Обозначим символом $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$ волновую функцию, удовлетворяющую уравнению Липпмана — Швингера с функцией Грина $G_0^{(-)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \int G_0^{(-)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\, V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}^{-}(\mathbf{r}')\, \mathrm{d}^3 r' \,, \quad (1.42)$$

где $G_0^{(-)}$ дается выражением (1.22). Найти асимптотику функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$.

1.2. Показать, что при любом вещественном $V(\mathbf{r})$ функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$ связаны соотношением

$$[\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})]^* = \psi_{-\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad , \qquad (1.43)$$

которое справедливо во всей области изменения $\mathbf{r}$.

1.3. Найти функцию Грина свободной частицы $\tilde{G}_0(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, вычисляя интеграл (1.18) в смысле главного значения. Какова асимптотика волновой функции $\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, удовлетворяющей уравнению Липпмана — Швингера с функцией Грина $\tilde{G}_0$? Есть ли связь между функцией $\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и функциями $\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r})$?

1.4. Проследить, как скажется на формулах для вычисления дифференциального сечения рассеяния ((1.41), (1.34) и др.) изменение нормировочного множителя плоской волны в асимптотическом условии (1.8). Убедиться в том, что сама величина $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ не зависит от выбора этого множителя.

Лекция 2. Борновское приближение

§2.1. Разложение амплитуды рассеяния по кратности взаимодействия. Борновское приближение

Соотношения (1.32) — (1.34) и (1.41), к которым в рамках стационарной теории сводится общее рассмотрение задачи потенциального рассеяния, дают лишь формальное решение этой задачи. Они не решают вопроса о том, как практически при заданном $V(\mathbf{r})$ найти волновую функцию $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$, ее асимптотику, амплитуду рассеяния и, следовательно, дифференциальное сечение.

Если потенциал $V(\mathbf{r})$ мал (об условиях малости см. § 2.2), то интегральное уравнение (1.32) можно решать приближенно, методом итераций:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \approx \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \int G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}'}\,\mathrm{d}^3r' + \cdots . \quad (2.1)$$

Такое представление волновой функции будем называть **разложением по кратности взаимодействия.** Подставляя (2.1) в (1.34) мы получим такое же разложение для амплитуды рассеяния:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\,V(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}\mathrm{d}^3r -$$

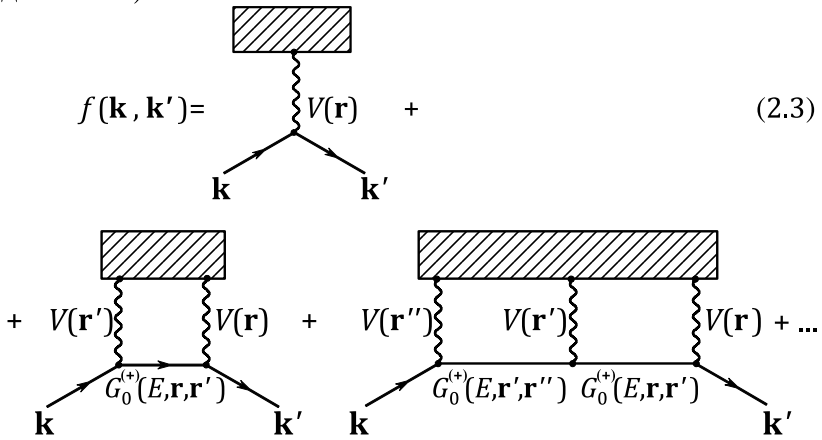
$$-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\iint \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}V(\mathbf{r})G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}'}\mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}^3r' + \cdots =$$

$$= f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \cdots \equiv \sum_{\mathrm{n}=1}^{\infty} f^{(\mathrm{n})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \ . \quad (2.2)$$

Будем говорить, что $f^{(\mathrm{n})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — это амплитуда n-го порядка в разложении амплитуды рассеяния по кратности взаимодействия.

В целях компактной записи амплитуд рассеяния различной кратности удобно пользоваться диаграммами Фейнмана (введенными им первоначально при рассмот-

рении процессов столкновений в квантовой электродинамике):



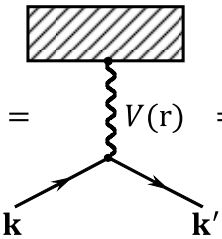
(2.3)

Для установления соответствия между диаграммой n-кратной амплитуды и ее аналитическим выражением сформулируем следующие правила. Сплошные линии со свободными концами изображают падающую и рассеянную частицы. Волнистая линия с жирной точкой в месте ее соединения со сплошной линией – взаимодействие между частицей и силовым центром. Между двумя такими точками («вершинами» диаграммы) частица движется свободно; соответствующему отрезку сплошной линии (скажем между точками $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$) приписывается функция Грина свободной частицы $G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Диаграмма n-го порядка содержит n вершин и соответственно $n-1$ внутренних сплошных линий. Аналитическое выражение, соответствующее такой диаграмме, есть $3n-$кратный интеграл по переменным $\mathbf{r},\ \mathbf{r}', \mathbf{r}''$ и т. д., подынтегральное выражение которого условимся записывать в следующей последовательности. Обходим диаграмму по ее сплошной линии в направлении, противоположном движению частицы. Первый множитель подынтегрального выражения — экспонента $e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$; далее в каждой вершине

добавляется множитель $V(\mathbf{r})$, $V(\mathbf{r}')$ и т.д., а между ними — функция Грина $G_0^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$, $G_0^{(+)}(E,\mathbf{r}',\mathbf{r}'')$ и т.д.; заканчивается подынтегральное выражение экспонентой $\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}$, где в показателе — переменная, соответствующая последней вершине диаграммы; перед интегралом стоит множитель $(-\mu/2\pi\hbar^2)$.

Если взаимодействие мало, то можно ограничиться первыми членами ряда (2.3). В частности, ограничиваясь одним первым членом, получаем амплитуду рассеяния в **приближении Борна (борновском приближении)**:

$$f^{(\mathrm{B})}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = f^{(1)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') =$$



$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\,V(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}\mathrm{d}^3r \ . \quad (2.4)$$

Обратим внимание на то, что в этом приближении при рассеянии частицы на **локальном** потенциале $V(\mathbf{r})$ любой радиальной и угловой зависимости амплитуда рассеяния $f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ зависит лишь от разности импульсов частицы в начальном и конечном состояниях — **переданного импульса**:

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \ , \quad (2.5)$$

а сама зависимость от $\mathbf{q}$ определяется просто фурье-образом потенциала $V(\mathbf{r})$:

$$f^{(\mathrm{B})} = f^{(\mathrm{B})}(\mathbf{q}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\,\mathrm{d}^3r \ . \quad (2.6)$$

Итак, в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния частицы силовым центром рассчитывается по формуле

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f^{(\mathrm{B})}(\mathbf{q})|^2 = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left| \int V(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\, \mathrm{d}^3 r \right|^2 \quad . \quad (2.7)$$

Подчеркнем, что вектор переданного импульса $\mathbf{q}$ — это единственная комбинация энергии частицы и углов рассеяния, от которой в борновском приближении зависит дифференциальное сечение рассеяния. Если потенциал обладает сферической симметрией:

$$V(\mathbf{r}) = V(r) \ , \quad (2.8)$$

то и борновская амплитуда рассеяния, и соответствующее дифференциальное сечение зависят лишь от одной переменной — модуля переданного импульса. В этом важном частном случае интегрирование по угловым переменным в (2.6) приводит к выражению

$$f^{(\mathrm{B})} = f^{(\mathrm{B})}(q) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty V(r) \sin(qr) r \mathrm{d}r \quad . \quad (2.9)$$

§ 2.2. Об условиях применимости борновского приближения

При вычислении борновской амплитуды рассеяния мы подставили в общее выражение (1.34) вместо точного решения уравнения Липпмана — Швингера $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ плоскую волну $\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}$, описывающую падающую частицу. Это значит, что во всей «внутренней» области второй член в (1.32) считается малым по сравнению с первым:

$$\left| \int G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\, V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}')\, \mathrm{d}^3 r' \right|_{r<d} \ll 1 \ . \quad (2.10)$$

Неравенство (2.10) является достаточным условием применимости борновского приближения. Для приближенной оценки входящего сюда интеграла заменим точное

решение $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ плоской волной; подставляя также в качестве $G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ее явное выражение (1.21), получаем

$$\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left|\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, V(\mathbf{r}')\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'}\, d^3r'\right| \ll 1\ . \qquad (2.11)$$

Дальнейшее прямое вычисление интеграла весьма громоздко даже в случае простейших потенциалов. Поэтому мы ограничимся еще более грубой оценкой, рассмотрев неравенство (2.11) лишь в точке $r = 0$, а потенциал $V(\mathbf{r})$ считая сферически-симметричным:

$$\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left|\int \exp\{ikr' + i\mathbf{k}\mathbf{r}'\}\frac{1}{r'}\, V(\mathbf{r}')\ d^3r'\right| =$$

$$= \frac{\mu}{k\hbar^2}\left|\int_0^\infty V(r)(e^{2ikr} - 1)dr\right| \ll 1\ . \qquad (2.12)$$

Напомним, что все наше рассмотрение относится к классу потенциалов конечного радиуса. Поэтому фактически интегрирование в (2.12) распространяется лишь на «внутреннюю» область $r \lesssim d$.

Далее мы рассмотрим неравенство (2.12) в двух предельных случаях: $kd \ll 1$ и $kd \gg 1$. В первом из них дебройлевская длина волны частицы $\lambda\!\!\!^{-} = 1/k$ много больше, а во втором — много меньше, чем размеры области взаимодействия d. Простые вычисления приводят к следующим результатам.

Если $kd \gg 1$, то

$$|\bar{V}| \ll \frac{1}{kd}\frac{\hbar^2k^2}{\mu} = \frac{2}{kd}\, E\ , \qquad (2.13)$$

при этом $\bar{V} = (1/d)\int V(r)dr$.

Если $kd \ll 1$, то

$$|\bar{V}| \ll \frac{\hbar^2}{\mu d^2} \quad , \tag{2.14}$$

при этом $\bar{V} = (1/d^2)\int V(r)\, r\mathrm{d}r$.

Мы видим, что при $kd \gg 1$ условие (2.13) гораздо сильнее, чем просто требование

$$|\bar{V}| \ll E \quad , \tag{2.15}$$

выражающее малость средней энергии взаимодействия по сравнению с энергией падающих частиц. При $kd \ll 1$ условие (2.14) в случае притяжения практически совпадает с требованием, чтобы в потенциальной яме средней глубины $\bar{V}$ и среднего радиуса d не было ни одного связанного состояния (см. [1, с. 121]).

Оба неравенства — (2.13) и (2.14) — дают лишь приблизительную оценку применимости борновского приближения, ничего не говоря, в частности, по следующему, практически очень важному вопросу: как зависит применимость борновских расчетов дифференциального сечения рассеяния от угла вылета рассеянных частиц? Мы вернемся к этому вопросу в § 3.4.

§ 2.3. Угловая и энергетическая зависимости рассеяния быстрых частиц на потенциале конечного радиуса

В этом параграфе мы выясним общие качественные закономерности рассеяния быстрых частиц ($kd \gg 1$) на потенциале конечного радиуса. Будем считать выполненным условие применимости борновского приближения (2.13). Начнем с конкретного примера: вычислим в борновском приближении дифференциальное и полное сечения рассеяния частиц потенциалом Юкавы (или, что то же, экранированным кулоновским потенциалом):

$$V(\mathrm{r}) = \mathrm{A}\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r} \quad . \tag{2.16}$$

Подставляя (2.16) в (2.6), найдем сначала амплитуду рассеяния:

$$f^{(\mathrm{B})}(q) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\mathrm{A}a^2}{1+(qa)^2} \quad , \tag{2.17}$$

а затем и дифференциальное сечение:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f^{(\mathrm{B})}(q)|^2 = \frac{4\mu^2\mathrm{A}^2a^4}{\hbar^4}\frac{1}{[1+(qa)^2]^2} \quad . \tag{2.18}$$

Угловая зависимость дифференциального сечения (2.18) заключена в передаваемом импульсе q (рис. 2.1):

$$q = 2k\sin\frac{\theta}{2} \quad . \tag{2.19}$$

Подставим (2.19) в (2.18):

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{4\mu^2\mathrm{A}^2a^4}{\hbar^4}\frac{1}{[\,1+4k^2a^2\sin^2\frac{\theta}{2}\,]^2} \quad . \tag{2.20}$$

Отсюда видно, что в данном случае максимум интенсивности рассеянных частиц приходится на нулевой угол $\theta = 0$, причем она монотонно спадает с ростом угла рассеяния. Скорость спадания тем больше, чем больше энергия падающих частиц; другими словами, с ростом энергии угловое распределение рассеянных частиц оказывается все более резко направленным вперед (рис. 2.2).

Вычислим интегральное сечение рассеяния:

$$\sigma = \int \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\,\mathrm{d}\Omega \quad . \tag{2.21}$$

Для этого заметим, что когда потенциал сферически симметричен и дифференциальное сечение известно как функция передаваемого импульса q, то интегрирование в (2.21) удобно выполнять непосредственно по переданному импульсу. Согласно (2.19),

$$\mathrm{d}\Omega = 2\pi \frac{q\mathrm{d}q}{k^2} \quad , \tag{2.22}$$

$$q_{\min} = 0 \, , \qquad q_{\max} = 2k \quad . \tag{2.23}$$

Подставляя (2.18) в (2.21), получаем

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{2k} \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \, q \, \mathrm{d}q = \frac{16\pi\mu^2 \mathrm{A}^2 a^4}{\hbar^4} \frac{1}{1+4k^2a^2} \quad . \tag{2.24}$$

Отсюда видно, что при $ka \gg 1$ интегральное сечение рассеяния, рассчитанное в борновском приближении, убывает с ростом энергии частиц по закону

$$\sigma|_{ka\gg 1} \sim \frac{1}{E} \quad . \tag{2.25}$$

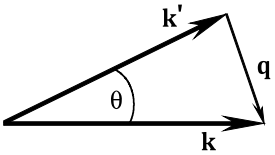


Рис. 2.1. Кинематика рассеяния частицы на неподвижном силовом центре.

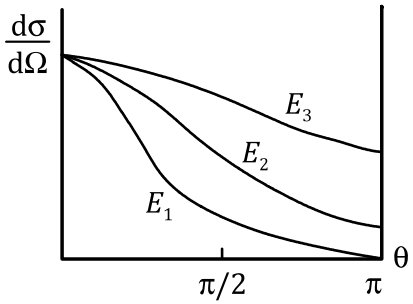


Рис. 2.2 Угловая зависимость рассеяния частиц потенциалом Юкавы или экранированным кулоновским потенциалом для разных значений энергии падающих частиц: $E_1 > E_2 > E_3$

Отмеченные выше качественные закономерности относится к рассеянию быстрых частиц не только на потенциале Юкавы, но и на многих других потенциалах конечного радиуса, в том числе к рассеянию на всех потенциалах (1.26) — (1.29), приведённых в лекции 1. Действительно, обратимся к общей формуле (2.6) для

борновской амплитуды рассеяния, переписав ее для случая сферически-симметричного потенциала:

$$f^{(\mathrm{B})}(\mathbf{q}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\,\mathrm{d}^3r\ . \qquad (2.26)$$

Борновская амплитуда рассеяния вперед $f^{(\mathrm{B})}(0)$ и соответствующее дифференциальное сечение $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega\,(\theta = 0)$ не зависят, как видно отсюда, от энергии падающих частиц (см. снова (2.20) и рис. 2.2). Поскольку интегрирование в (2.26) фактически охватывает область $r \ll d$, где d — средний радиус действия силового центра, то благодаря осцилляциям экспоненты $\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}$ амплитуда рассеяния $f^{(\mathrm{B})}(\mathbf{q})$ быстро затухает при $q > 1/d$. При $kd \gg 1$ это, согласно (2.19), означает, что рассеянные частицы сосредоточены в узком конусе, средний угол раствора которого определяется выражением

$$\theta = 1/kd \ll 1 \quad ,$$

т.е. падает с ростом энергии по закону $1/E^{1/2}$. Соответствующий телесный угол падает по закону $1/E$, а поскольку дифференциальное сечение рассеяния вперед не зависит от энергии, то по такому же закону падает и интегральное сечение рассеяния σ. В частном случае потенциала Юкавы мы уже видели это из соотношения (2.24).

§ 2.4. Формула Резерфорда. Рассеяние точечного заряда неподвижным протяженным зарядом

Потенциал (2.16) при $\mathrm{A} = \mathrm{Z}_1\mathrm{Z}_2e^2$ и $a \to \infty$ описывает кулоновское взаимодействие двух точечных зарядов Z_1 и Z_2. В этом случае выражение (2.17) даст борновскую амплитуду кулоновского рассеяния:

$$f_{\mathrm{c}}^{(\mathrm{B})}(\theta) = -\frac{2\mu e^2\mathrm{Z}_1\mathrm{Z}_2}{\hbar^2 q^2}\ , \qquad (2.27)$$

а формула (2.20) для дифференциального сечения переходит в этом случае в формулу Резерфорда:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{R}} = \frac{4\mu^2 e^4 \mathrm{Z}_1^2 \mathrm{Z}_2^2}{\hbar^4 q^4} = \frac{\mu^2 \mathrm{Z}_1^2 \mathrm{Z}_2^2 e^4}{4\hbar^4 k^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad . \quad (2.28)$$

Полное сечение σ, очевидно, расходится. Случай кулоновского взаимодействия двух нерелятивистских точечных зарядов уникален в том отношении, что здесь строго совпадают между собой результаты для дифференциального сечения рассеяния, полученные тремя совершенно разными способами: а) при точном решении задачи в классической механике; б) в борновском приближении; в) при точном решении задачи в квантовой механике (лекция 5). В этом проявляются в конечном счете особые симметрийные свойства кулоновского гамильтониана, хорошо известные по эффекту случайного вырождения уровней частицы в кулоновском поле [1, с.224].

Перейдем к рассмотрению рассеяния точечного заряда неподвижным протяженным зарядом. Пусть Z_1 — заряд падающей частицы, $\rho(\mathbf{r})$ — плотность заряда, на котором происходит рассеяние; пусть $\rho(\mathbf{r})$ нормировано условием

$$\int \rho(\mathbf{r})\, \mathrm{d}^3 r = \mathrm{Z}_2 \quad . \quad (2.29)$$

На больших расстояниях заряды Z_1 и Z_2. взаимодействуют по закону Кулона $V_{\mathrm{c}}(r) = \mathrm{Z}_1 \mathrm{Z}_1 e^2 / r$, а при произвольных r потенциальная энергия их взаимодействия определяется выражением

$$V(\mathbf{r}) = \mathrm{Z}_1 e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, \mathrm{d}^3 r' \quad . \quad (2.30)$$

Подставим его в формулу (2.6) для борновской амплитуды рассеяния:

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{\mu Z_1 e^2}{2\pi\hbar^2}\iint \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\,\mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}^3r' \ . \quad (2.31)$$

Двойной интеграл вычислим с помощью следующего приема:

$$\iint \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\,\mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}^3r' \ =$$

$$= \iint \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}'}\,\mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}^3r' \ = \quad (2.32)$$

$$= \int \rho(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}'}\,\mathrm{d}^3r' \int \frac{\mathrm{e}^{i\mathbf{qx}}}{|\mathbf{x}|}\mathrm{d}^3x \ = \frac{4\pi}{q^2}\int \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\,\mathrm{d}^3r \ .$$

Фурье-образ плотности называется **формфактором плотности заряда**, или просто **зарядовым формфактором** мишени. Мы определим зарядовый формфактор $\mathrm{F}(\mathbf{q})$, соответствующий плотности заряда $\rho(\mathbf{r})$, с помощью соотношения:

$$\mathrm{F}(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{Z_2}\int \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\,\mathrm{d}^3r \ . \quad (2.33)$$

Подставляя (2.32) и (2.33) в (2.31), получаем, что в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния точечного заряда протяженным зарядом разбивается на два множителя: дифференциальное сечение $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_\mathrm{R}$ (формула Резерфорда), соответствующее взаимодействию точечных зарядов Z_1 и Z_2, и квадрат модуля зарядового формфактора мишени:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_\mathrm{R}|\mathrm{F}(\mathbf{q})|^2 = \frac{\mu^2 Z_1^2 Z_2^2 e^4}{4\hbar^4 k^4}\frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}}|\mathrm{F}(\mathbf{q})|^2 \ . \quad (2.34)$$

Рассмотрим общие свойства зарядового формфактора и то, как проявляются они в процессе рассеяния.

Во-первых, заметим, что если распределение заряда сферически-симметрично, то и формфактор тоже зависит лишь от модуля переданного импульса:

$$\rho(\mathbf{r}) \to \rho(r)\,,$$

$$\mathrm{F}(\mathbf{q}) \to \mathrm{F}(q) = \frac{4\pi}{\mathrm{Z}_2}\left(\frac{1}{q}\right)\int_0^\infty \rho(r)\ \sin(qr)\, r\mathrm{d}r\ . \qquad (2.35)$$

Из формулы (2.34) видно, что в этом случае, как следует и из общих соображений, угловое распределение рассеянных частиц аксиально-симметрично.

Согласно определению (2.33) и условию (2.29), при $q = 0$ (если $\mathrm{Z}_2 \neq 0$) формфактор равен единице

$$\mathrm{F}(0) = 1\ . \qquad (2.36)$$

Подставляя это значение в (2.34), видим, что при $q \to 0$, т.е при $\theta \to 0$, пролетающая частица «не чувствует» конечных размеров мишени, и рассеяние происходит как при взаимодействии точечных зарядов. Физически это тот же результат, что известен в классической механике: при рассеянии на малые углы θ частица пролетает на больших расстояниях от мишени и не чувствует деталей ее структуры. С ростом q формфактор $\mathrm{F}(\mathbf{q})$ сначала плавно падает, затем возможны его осцилляции, а при $q \gg R$, где R – средние размеры мишени, быстро затухают. Таким образом, угловое распределение частиц, рассеянных на протяженном заряде, всегда характеризуется более острой направленностью вперед, чем при рассеянии на точечном заряде.

При малых значениях переданного импульса формфактор $\mathrm{F}(\mathbf{q})$ можно разложить в ряд по степеням $\mathbf{q}$. Сделаем это для случая сферически-симметричного распределения зарядовой плотности:

$$\mathrm{F}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\mathrm{Z}_2}\int \rho(r)\left\{1 + i(\mathbf{qr}) - \frac{1}{2}(\mathbf{qr})^2 + \cdots\right\}\mathrm{d}^3r =$$

$$= 1 - \frac{1}{6} r_{\mathrm{m}}^2 q^2 + \ \ldots ; \qquad (2.37)$$

Здесь

$$r_{\mathrm{m}} = \left(\frac{1}{\mathrm{Z}_2} \int \rho(r)\ r^2 \mathrm{d}r \right)^{1/2} \qquad (2.38)$$

— среднеквадратичный радиус распределения заряда мишени. Отсюда видно, что измерение дифференциального сечения рассеяния на малые углы дает — в условиях применимости борновского приближения — модельно независимый способ нахождения среднеквадратичного зарядового радиуса мишени.

Упражнения

2.1. Пользуясь правилами для диаграмм Фейнмана записать амплитуду рассеяния 3-го порядка $f^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$.

2.2. Показать, что амплитуду рассеяния второго порядка $f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ можно выразить через обобщенную борновскую амплитуду рассеяния $f^{(\mathrm{B})}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, определенную, согласно общей формуле (2.4), для несовпадающих по абсолютной величине импульсов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$:

$$f^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') =$$

$$= -\frac{1}{2\pi^2} \int \frac{f^{(\mathrm{B})}(\varkappa, \mathbf{k}') f^{(\mathrm{B})}(\mathbf{k}, \varkappa)}{k^2 - \varkappa^2 + i\varepsilon}\ \mathrm{d}^3\varkappa \Big|_{\varepsilon \to +0} . \qquad (2.39)$$

2.3. В борновском приближении вычислить дифференциальное и полное сечения рассеяния частиц на потенциале прямоугольной формы.

2.4. Вычислить формфактор равномерно заряженного шара. Используя борновское приближение, описать характер углового распределения быстрых электронов, рассеянных таким шаром.

2.5. Считая, что ядро — это равномерно заряженный шар радиуса $R = r_0\, \mathrm{A}^{1/3}$, и используя борновское прибли-

жение, найти дифференциальное сечение упругого рассеяния на ядре быстрых электронов. Сравнить результаты для ядер ^{4}He и ^{16}O.

2.6. В борновском приближении получить общую формулу дифференциального сечения рассеяния протяженного заряда неподвижным протяженным зарядом.

2.7. Пользуясь борновским приближением, найти угловое распределение электронов, рассеянных двумя точечными зарядами $+e$ и $-e$, неподвижно закрепленными на расстоянии d друг относительно друга. Рассмотреть два случая: ось, соединяющая заряды $+e$ и $-e$, расположена параллельно и перпендикулярно потоку падающих электронов.

Лекция 3. Рассеяние на сферически-симметричном потенциале. Разложение по парциальным волнам

§3.1. Дифференциальное и интегральное уравнения для радиальных волновых функций

В сферически-симметричном поле орбитальный момент частицы сохраняется. Применительно к задаче рассеяния это означает, что если представить падающий поток частиц как совокупность **парциальных волн**, соответствующих определенным значениям орбитального момента частицы, то каждая такая волна рассеивается на силовом центре независимо от других парциальных волн. С математической точки зрения это создает упрощение задачи, поскольку, решая волновое уравнение для каждой парциальной волны в отдельности, легко разделить переменные волновой функции и, в отличие от общего случая (1.4) или (1.9), свести дело к одномерным дифференциальным или интегральным уравнениям. С физической точки зрения важнейшим новым для нас аспектом при решении задачи рассеяния методом парциальных волн является вопрос о том, как интерферируют между собой разные парциальные волны, попадая

в детектор рассеянных частиц. Рассмотрев взаимное поведение парциальных волн на больших расстояниях от рассеивающего центра, мы увидим, что вклад каждой из них в амплитуду рассеяния (а следовательно, в дифференциальное и полное сечения рассеяния) определяется всего лишь одним вещественным параметром — **фазой рассеяния**. Величина и энергическая зависимость фаз рассеяния определяются видом потенциальной энергии $V(r)$.

Перейдем к последовательному изложению метода парциальных волн.

Из симметрийных соображений вполне ясно, что в случае рассеяния частицы сферически-симметричным потенциалом амплитуда рассеяния $f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ зависит лишь от модуля импульса $k = |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ (т. е. от энергии частицы E) и от угла θ между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ — **угла рассеяния.** Волновая функция задачи рассеяния $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ удовлетворяет теперь уравнению

$$\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \int G_0^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\, V(r')\, \psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}')\, \mathrm{d}^3 r' \quad , \quad (3.1)$$

где, в отличие от (1.34), вместо $V(\mathbf{r})$ стоит $V(r)$ и поэтому она тоже зависит лишь от r и угла θ_r между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{r}$, но не зависит от азимутального угла. Представим $\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r})$ в виде разложения по полиномам Лежандра от косинуса угла θ_r:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \mathrm{R}_\ell(r)\mathrm{P}_\ell(\cos\theta_r) \quad . \quad (3.2)$$

Функции $\mathrm{R}_\ell(r)$ будем называть **радиальными функциями задачи рассеяния.** Они, конечно, удовлетворяют тому же дифференциальному уравнению — **радиальному уравнению Шредингера,** что и радиальные волновые функции в задаче о связанных состояниях частицы:

$$\frac{\mathrm{d}^2(r\mathrm{R}_\ell)}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}-V(r)\right](r\mathrm{R}_\ell)=0\ . \quad (3.3)$$

Однако, имея дело с задачей рассеяния, где более тонко стоит вопрос о дополнительных условиях к решению волнового уравнения, удобно наряду с дифференциальным уравнением (3.3) построить также и интегральное уравнение для функции $\mathrm{R}_\ell(r)$, соответствующее интегральному уравнению (3.1).

Для этого подставим (3.2) в (3.1), разложим по парциальным волнам плоскую волну [1, с. 271]:

$$\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}=\sum_\ell i^\ell(2\ell+1)\,\mathrm{j}_\ell(kr)\,\mathrm{P}_\ell(\cos\theta_r)\quad , \qquad (3.4)$$

где $\mathrm{j}_\ell(kr)$ —сферическая функция Бесселя, и, умножив правую и левую части уравнения на $\mathrm{P}_\ell(\cos\theta_r)$, воспользуемся свойством ортонормированности полиномов Лежандра:

$$\int \mathrm{P}_\ell(\cos\theta_r)\,\mathrm{P}_{\ell'}(\cos\theta_r)\mathrm{d}\Omega_r=\delta_{\ell\ell'}\frac{4\pi}{2\ell+1}\ . \quad (3.5)$$

В результате

$$\mathrm{R}_\ell(r)=i^\ell(2\ell+1)\,\mathrm{j}_\ell(kr)+$$

$$+\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\sum_{\ell'=0}^{\infty}\int \mathrm{d}\,\Omega_r\,\mathrm{d}\Omega_{r'}\,\mathrm{P}_\ell(\cos\theta_r)\times$$

$$\times G_0^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\mathrm{P}_\ell(\cos\theta_{r'})V(r')\mathrm{R}_{\ell'}(r')r'^2\mathrm{d}r'\ . \quad (3.6)$$

Воспользуемся выражением (1.21) для функции Грина, а также известным в теории специальных функций разложением [3]:

$$\frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}=\frac{\pi i}{2\sqrt{rr'}}\sum_{\lambda=0}^{\infty}(2\lambda+1)\mathrm{J}_{\lambda+\frac{1}{2}}(kr_<)\mathrm{H}^{(1)}_{\lambda+\frac{1}{2}}(kr_>)\mathrm{P}_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\,\hat{\mathbf{n}}')=$$

$$= ik \sum_{\lambda=0}^{\infty} (2\lambda + 1)\, \mathrm{j}_\lambda(kr_<)\, \mathrm{h}_\lambda^{(1)}(kr_>) \mathrm{P}_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\, \hat{\mathbf{n}}') \; = \qquad (3.7)$$

$$= -k \sum_{\lambda=0}^{\infty} (2\lambda + 1)\, \mathrm{j}_\lambda(kr_<)\, [\mathrm{n}_\lambda(kr_>) - i\mathrm{j}_\lambda(kr_>)] \mathrm{P}_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\, \hat{\mathbf{n}}')$$

где $r_<$ — меньшее, а $r_>$ — большее из значений r и r', $\hat{\mathbf{n}}$ и $\hat{\mathbf{n}}'$ — единичные векторы в направлении векторов $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, а $\mathrm{n}_\lambda(x)$ — сферическая функция Неймана. Подставляя (3.7) в (3.6) и используя известные формулы

$$\mathrm{P}_\lambda(\hat{\mathbf{n}}\, \hat{\mathbf{n}}') = \frac{4\pi}{2\lambda + 1} \sum_{\mu} \mathrm{Y}^*_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}}) \mathrm{Y}_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}}') \;, \qquad (3.8)$$

$$\mathrm{P}_\lambda(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda + 1}}\, \mathrm{Y}_{\lambda 0}(\theta, 0) \;, \qquad (3.9)$$

получаем интегральное уравнение для радиальных функций $\mathrm{R}_\ell(r)$ в окончательном виде:

$$\mathrm{R}_\ell(r) = i^\ell (2\ell + 1)\, \mathrm{j}_\ell(kr) + \\ + \int_0^\infty G^{(+)}_{0,\ell}(E, r, r')\, V(r')\, \mathrm{R}_\ell(r') r'^2 \mathrm{d}r' \quad , \qquad (3.10)$$

где

$$G^{(+)}_{0,\ell}(E, r, r') = \frac{2\mu k}{\hbar^2} \mathrm{j}_\ell(kr_<)[\, \mathrm{n}_\ell(kr_>) - i\mathrm{j}_\ell(kr_<)] \qquad (3.11)$$

функция Грина для ℓ −й парциальной волны свободной частицы.

Рассмотрим асимптотику радиальных функций $\mathrm{R}_\ell(r)$ при больших r. Для этого нам понадобятся асимптотические выражения сферических функций Бесселя и Неймана, входящих в (3.10) и (3.11) [1, с. 269]:

$$\mathrm{j}_\ell(x)|_{x\to\infty} = \frac{\sin\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{x} \quad , \tag{3.12}$$

$$\mathrm{n}_\ell(x)|_{x\to\infty} = -\frac{\cos\left(x - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{x} \quad . \tag{3.13}$$

Подставляя их в (3.11), получаем

$$\mathrm{R}_\ell(r)|_{r\to\infty} = i^\ell(2\ell+1)\,\frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} -$$

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2}(-i)^\ell\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\int\limits_0^\infty \mathrm{j}_\ell(kr')\,V(r')\,\mathrm{R}_\ell(r')r'^2\mathrm{d}r' \quad . \tag{3.14}$$

Здесь мы ограничились случаем потенциала конечного радиуса. Введем обозначение

$$f_\ell(k) = -(-i)^\ell\int\limits_0^\infty \mathrm{j}_\ell(kr)\,\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\,\mathrm{R}_\ell(r)\,r^2\,\mathrm{d}r \tag{3.15}$$

и запишем с его помощью асимптотическое выражение (3.14) более компактно:

$$\mathrm{R}_\ell(r)|_{r\to\infty} = i^\ell(2\ell+1)\frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} + f_\ell\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \quad . \tag{3.16}$$

Подставляя это выражение в (3.2) и снова используя (3.4), получаем

$$\psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|_{\mathrm{r}\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \sum_{\ell=0}^{\infty} f_\ell \mathrm{P}_\ell(\cos\theta_\mathrm{r})\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \quad . \tag{3.17}$$

Отсюда видно, что f_ℓ — это коэффициент разложения амплитуды рассеяния по полиномам Лежандра:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_\ell(k)\mathrm{P}_\ell(\cos\theta) \quad . \tag{3.18}$$

Мы будем называть их **парциальными амплитудами рассеяния**.

§ 3.2. Фазы рассеяния

Перестроим асимптотическое выражение (3.16), придав ему вид суперпозиции сходящейся и расходящейся сферических волн:

$$\mathrm{R}_\ell(r)\big|_{r\to\infty} = \frac{i^\ell(2\ell+1)}{2ik}\left\{\frac{\mathrm{e}^{i\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}\right)}}{r} - \frac{\mathrm{e}^{-i\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}\right)}}{r} + \right.$$

$$\left. + \frac{2ik}{i^\ell(2\ell+1)} f_\ell \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\right\} = -\frac{i^\ell(2\ell+1)}{2ik} \times \tag{3.19}$$

$$\times \left\{\frac{\mathrm{e}^{-i\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}\right)}}{r} - \left[1+\frac{2ik}{2\ell+1}f_\ell\right]\frac{\mathrm{e}^{i\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}\right)}}{r}\right\} \quad .$$

При движении частиц в поле, описываемом вещественным потенциалом, число частиц сохраняется. Это значит, что на асимптотически большом расстоянии от силового центра $(r \gg d)$ интенсивности сходящейся к центру сферической волны e^{-ikr}/r и расходящейся из центра сферической волны e^{ikr}/r равны друг другу. В свою очередь это означает, что на коэффициент перед расходящейся волной в (3.19) наложено условие:

$$\left|1+\frac{2ik}{2\ell+1}f_\ell\right| = 1 \quad . \tag{3.20}$$

Условие (3.20) позволяет ввести для описания каждой парциальной амплитуды рассеяния $f_\ell(k)$, являющейся, вообще говоря, комплексной функцией энергии (импульса) частицы, одну вещественную функцию $\delta_\ell(k)$, называемую **фазой рассеяния:**

$$1+\frac{2ik}{2\ell+1}f_\ell(k)=\mathrm{e}^{2i\delta_\ell(k)}\ . \qquad (3.21)$$

То же соотношение полезно записать и по-другому:

$$f_\ell=\frac{1}{2ik}(2\ell+1)\left(\mathrm{e}^{2i\delta_\ell(k)}-1\right)\ . \qquad (3.22)$$

При каждом значении энергии (импульса) частицы фазы рассеяния δ_ℓ полностью определяют асимптотический вид радиальной функции $\mathrm{R}_\ell(r)$ соответствующей парциальной волны. Подставляя (3.21) в (3.19), получаем

$$\mathrm{R}_\ell(r)\big|_{r\to\infty}=\frac{i^\ell(2\ell+1)}{k}\mathrm{e}^{i\delta_\ell}\frac{\sin(kr-\frac{\ell\pi}{2}+\delta_\ell)}{r}\ . \qquad (3.23)$$

Как видно из (3.15), при «выключении» взаимодействия частицы с силовым центром ($V\to0$) обращаются в нуль все парциальные амплитуды рассеяния f_ℓ, а вместе с ними, согласно (3.21), и все фазы δ_ℓ. При этом асимптотическое выражение (3.23) превращается в асимптотику ℓ-й составляющей волновой функции свободной частицы:

$$\mathrm{R}_\ell^{(\mathrm{free})}(r)\big|_{r\to\infty}=i^\ell(2\ell+1)\mathrm{j}_\ell(kr)\Big|_{r\to\infty}=$$

$$=\frac{i^\ell(2\ell+1)}{k}\frac{\sin\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}\right)}{r}\ . \qquad (3.24)$$

Сравнение выражений (3.24) и (3.23), отличающихся фазовым сдвигом в аргументе синуса, позволяет лучше понять смысл термина «фаза рассеяния».

Выразив через фазы рассеяния δ_ℓ парциальные амплитуды f_ℓ, мы можем, пользуясь соотношениями (3.18) и (1.41), выразить через них полную амплитуду рассеяния, дифференциальное сечение, а затем и полное сечение рассеяния:

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_\ell \mathrm{P}_\ell(\cos\theta) =$$

$$= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(\mathrm{e}^{2i\delta_\ell}-1\right)\mathrm{P}_\ell(\cos\theta) \quad , \qquad (3.25)$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\theta)|^2 = \sum_{\ell,\ell'=0}^{\infty} f_\ell\, f_{\ell'}^{*}\, \mathrm{P}_\ell(\cos\theta)\mathrm{P}_{\ell'}(\cos\theta) \quad , \qquad (3.26)$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell \qquad (3.27)$$

(при получении последней формулы мы воспользовались свойством ортонормированности полиномов Лежандра (3.5)). Формула (3.26) показывает, что угловое распределение рассеянных частиц зависит от интерференции между парциальными волнами с разными значениями орбитального момента частицы. Однако в полном сечении рассеяния σ после интегрирования по всем углам вылета рассеянной частицы эффект интерференции пропадает.

Сравнение формул (3.25) и (3.27) позволяет установить интересное соотношение между мнимой частью амплитуды рассеяния вперёд и полным сечением рассеяния:

$$\mathrm{Im}\, f(0) = \frac{k}{4\pi}\sigma_{\mathrm{tot}} \quad . \qquad (3.28)$$

Это так называемая **оптическая теорема.** Доказанная нами для случая потенциального рассеяния, она (мы увидим это в дальнейшем) справедлива и в общем случае многоканального рассеяния. Мы будем обращаться к оптической теореме как к строгому и модельно независимому соотношению при оценке качества приближенных методов теории столкновений.

§ 3.3. Энергетическая зависимость фаз рассеяния при низких энергиях

При низких энергиях, когда импульс падающих частиц много меньше обратного радиуса взаимодействия ($kd \ll 1$), зависимость фаз рассеяния от энергии носит универсальный характер. Чтобы установить эту зависимость, обратимся сначала к формулам (3.15) и (3.21). Исключив из них $f_\ell(k)$, получаем

$$e^{i\delta_\ell} \sin\delta_\ell =$$

$$= -(-i)^\ell \frac{k}{2\ell+1} \int_0^\infty \mathrm{j}_\ell(kr) \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)\right] \mathrm{R}_\ell(r) r^2 \, \mathrm{d}r \,. \quad (3.29)$$

Это строгое соотношение, связывающее фазу рассеяния ℓ −й парциальной волны с соответствующей радиальной функцией $\mathrm{R}_\ell(r)$ во внутренней области $r < d$, аналогично соотношению (1.34) в общей формулировке задачи потенциального рассеяния. Рассмотрим правую часть соотношения (3.29) при $kd \ll 1$. Для этого нам понадобятся предельные выражения сферических функций Бесселя и сферических функций Неймана при малых значениях аргумента:

$$\mathrm{j}_\ell(x)|_{x\to 0} \approx \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad , \quad (3.30)$$

$$\mathrm{n}_\ell(x)|_{x\to 0} \approx -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \,. \quad (3.31)$$

Рассматривая с учетом этих свойств функций $\mathrm{j}_\ell(x)$ и $\mathrm{n}_\ell(x)$ соотношение (3.11), видим, что функция Грина $G_{0,\ell}^{(+)}(E,r,r')$ при $k \to 0$ теряет зависимость от энергии (импульса) частицы:

$$G_{0,\ell}^{(+)}(E,r,r')\Big|_{k\to 0} = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2\ell+1}\frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}} \quad . \qquad (3.32)$$

Обращаясь теперь к интегральному уравнению (3.10), получаем, что при $k \to 0$ решение этого уравнения $\mathrm{R}_\ell(r)$ ведет себя в зависимости от k так же, как сферическая функция Бесселя $\mathrm{j}_\ell(kr)$, т.е. пропорционально k^ℓ. Следовательно, из (3.29) вытекает

$$\delta_\ell(k)|_{k\to 0} \sim k^{2\ell+1} \sim E^{\ell+\frac{1}{2}} \quad . \qquad (3.33)$$

Это и есть искомая зависимость фаз рассеяния от энергии (импульса) частиц при малых энергиях. Она носит универсальный характер и присуща рассеянию на любом потенциале конечного радиуса.

§ 3.4. Методы вычисления фаз рассеяния

Точное решение задачи рассеяния с целью вычисления фаз рассеяния возможно лишь для отдельных искусственно придуманных потенциалов. На практике, когда приходится иметь дело с реалистическими потенциалами, фазы рассеяния всегда вычисляются приближенно, что связано либо с использованием тех или иных физических аппроксимаций, либо с проведением численного счета. Мы познакомимся с методами и того и другого родов.

а) Метод решения радиального уравнения Шредингера. Перепишем уравнение (3.3) в виде

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{u}_\ell}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - V(r)\right]\mathrm{u}_\ell = 0 \quad . \qquad (3.34)$$

Здесь, как и при решении задачи о связанных состояниях частицы [1, с.114], функции $\mathrm{u}_\ell(r)$ связаны с $\mathrm{R}_\ell(r)$ соотношением

$$\mathrm{u}_\ell(r) = r\mathrm{R}_\ell(r) \qquad (3.35)$$

и при малых r ведут себя согласно степенному закону:

$$\mathrm{u}_\ell(r)|_{r\to 0}\sim r^{\ell+1} \quad . \qquad (3.36)$$

Поведение $\mathrm{u}_\ell(r)$ при асимптотически больших r получаем из (3.23):

$$\mathrm{u}_\ell(r)|_{r\to\infty}\sim \sin\left(kr-\frac{\ell\pi}{2}+\delta_\ell\right) \quad . \qquad (3.37)$$

В общем случае уравнение (3.34) интегрируется численно, начиная от $r=0$; для «разгонки» численного интегрирования удобно использовать свойство (3.36). Мы не будем вдаваться в чисто вычислительные аспекты этой процедуры. Для нас важно, что задачей интегрирования является построение всего «профиля» функции $\mathrm{u}_\ell(r)$ с выходом при $r\to\infty$ на асимптотику (3.37); при этом должно быть соблюдено условие непрерывности функции $\mathrm{u}_\ell(r)$ и ее первой производной $\mathrm{u}'_\ell(r)$ во всей области $0<r<\infty$.

При рассеянии на потенциале конечного радиуса (пусть d — размеры области взаимодействия) в задаче имеются два масштаба измерения расстояний r: параметр d и длина волны $\lambda\!\!\!^{-}=1/k$. Соотношение (3.37), как и соотношение (3.23), из которого оно получено, справедливы, если выполняются два неравенства: $kr\gg 1$, $r>d$. Если энергия частицы E и размеры области взаимодействия d таковы, что условие $kr\gg 1$ не выполняется, то асимптотическое поведение (3.37) начинается далеко за границей области взаимодействия ($r\gg d$). В этом случае не рационально доводить численное интегрирование до асимптотически больших значений $r\gg d$, поскольку уже при $r>d$ частица движется свободно и уравнение (3.3) переходит в уравнение движения свободной частицы:

$$\frac{\mathrm{d}^2(r\mathrm{R}_\ell)}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right](r\mathrm{R}_\ell)=0 \quad . \qquad (3.38)$$

При $E > 0$ его линейно независимыми решениями являются сферическая функция Бесселя $\mathrm{j}_\ell(kr)$ и сферическая функция Неймана $\mathrm{n}_\ell(kr)$, а общее решение уравнения (3.34) при $r > d$ имеет вид

$$\mathrm{R}_\ell(r) = \frac{\mathrm{u}_\ell(r)}{r} = \mathrm{A}_\ell \mathrm{j}_\ell(kr) + \mathrm{B}_\ell \mathrm{n}_\ell(kr); \;\; r > d \;\; . \quad (3.39)$$

Вместо констант интегрирования A_ℓ и B_ℓ удобно выбрать две другие:

$$\mathrm{A}_\ell = \mathrm{C}_\ell \cos\delta_\ell \,; \quad \mathrm{B}_\ell = -\mathrm{C}_\ell \sin\delta_\ell \;\; . \quad (3.40)$$

Следовательно,

$$\mathrm{R}_\ell(r) = \frac{\mathrm{u}_\ell(r)}{r} =$$

$$= \mathrm{C}_\ell\{\cos\delta_\ell \;\mathrm{j}_\ell(kr) - \sin\delta_\ell \;\mathrm{n}_\ell(kr)\}; \;\; r > d \;\; . \quad (3.41)$$

С учетом (3.12) и (3.13) отсюда видно, что общее решение (3.39) имеет требуемую асимптотику (3.37).

Таким образом, практическая задача интегрирования уравнения (3.34) заключается в том, чтобы, начиная с $r = 0$, выйти в область свободного движения частицы $r > d$ и «сшить» волновую функцию, найденную для внутренней области, с функцией (3.41). Пусть $\mathrm{R}_\ell^{\mathrm{int}}(r) = \mathrm{u}_\ell^{\mathrm{int}}/r$— решение уравнения (3.3), (3.34), удовлетворяющее условию (3.36) и справедливое во всей внутренней области $0 < r < d$. Его «сшивание» с (3.41) означает:

$$\mathrm{R}_\ell^{\mathrm{int}}(d) = \mathrm{C}_\ell\{\cos\delta_\ell \;\mathrm{j}_\ell(kd) - \sin\delta_\ell \,\mathrm{n}_\ell(kd)\} \;\; , \quad (3.42)$$

$$\left.\frac{\mathrm{dR}_\ell^{\mathrm{int}}}{\mathrm{d}r}\right|_{r=d} = k\mathrm{C}_\ell\{\cos\delta_\ell \,\mathrm{j}'_\ell(kd) - \sin\delta_\ell \,\mathrm{n}'_\ell(kd)\} \;\; ,$$

где $\mathrm{j}'_\ell(x) \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{j}_\ell(x)$. Введем **логарифмическую производную волновой функции** $\mathrm{R}_\ell^{\mathrm{int}}(r)$ на границе области взаимодействия:

$$f_\ell \equiv \frac{1}{\mathrm{R}_\ell^{\mathrm{int}}} \frac{\mathrm{d}\mathrm{R}_\ell^{\mathrm{int}}}{\mathrm{d}r}\bigg|_{r=d} \quad . \tag{3.43}$$

Исключая из (3.42) константу C_ℓ (а вместе с ней и произвольно выбираемый при интегрировании уравнения (3.3) нормировочный множитель в $\mathrm{R}_\ell^{\mathrm{int}}(r)$), выражаем фазу рассеяния δ_ℓ через логарифмическую производную f_ℓ:

$$\mathrm{tg}\,\delta_\ell = \frac{\mathrm{j}'_\ell(kd) - \frac{f_\ell}{k}\mathrm{j}_\ell(kd)}{\mathrm{n}'_\ell(kd) - \frac{f_\ell}{k}\mathrm{n}_\ell(kd)} \quad . \tag{3.44}$$

В качестве примера рассчитаем фазы рассеяния частицы на прямоугольной яме:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, r \le d \\ 0, \quad r > d \end{cases} . \tag{3.45}$$

В этом случае для получения волновой функции $\mathrm{R}_\ell(r)$ во внутренней области не требуется численного интегрирования:

$$\mathrm{R}_\ell^{\mathrm{int}}(r) = \mathrm{const} \cdot \mathrm{j}_\ell(Kr) \ , \tag{3.46}$$

где

$$K = \frac{\sqrt{2\mu(E + V_0)}}{\hbar} \ , \tag{3.47}$$

Отсюда находим логарифмическую производную (3.43):

$$f_\ell = K\frac{\mathrm{j}'_\ell(Kd)}{\mathrm{j}_\ell(Kd)} \ , \tag{3.48}$$

а далее по формуле (3.44) и фазу рассеяния:

$$\mathrm{tg}\,\delta_\ell = \frac{K\,\mathrm{j}_\ell(kd)\,\mathrm{j}'_\ell(Kd) - k\,\mathrm{j}_\ell(Kd)\,\mathrm{j}'_\ell(kd)}{K\,\mathrm{n}_\ell(kd)\,\mathrm{j}'_\ell(Kd) - k\,\mathrm{j}_\ell(Kd)\,\mathrm{n}'_\ell(kd)} \quad . \tag{3.49}$$

В качестве другого примера рассмотрим рассеяние

частицы абсолютно твердой сферой. На поверхности такой сферы ($r = d$) «внешняя» волновая функция обращается в нуль:

$$\mathrm{R}_\ell(d) = 0 \ . \qquad (3.50)$$

Подставляя сюда (3.41), находим

$$\mathrm{tg}\,\delta_\ell = \mathrm{j}_\ell(kd)/\mathrm{n}_\ell(kd) \ . \qquad (3.51)$$

В частности, при малых энергиях частицы отсюда получаем

$$\delta_\ell|_{kd\ll 1} = -\frac{(kd)^{(2\ell+1)}}{(2\ell+1)!!\,(2\ell-1)!!} \ . \qquad (3.52)$$

б) Теория возмущений.

Если $V(r)$ мало, то радиальную функцию $\mathrm{R}_\ell(r)$, входящую в формулу (3.29) для фазы и удовлетворяющую уравнению (3.10), можно заменить во внутренней области ($r < d$) выражением $\mathrm{R}_\ell(r) \to i^\ell(2\ell+1)\,\mathrm{j}_\ell(kr)$. Тогда получаем приближенное выражение для фазы:

$$\mathrm{e}^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell \approx -k\int_0^\infty \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)[\mathrm{j}_\ell(kr)]^2 r^2\,\mathrm{d}r \ , \qquad (3.53)$$

а вместе с ним и для парциальной амплитуды рассеяния:

$$f_\ell \approx -(2\ell+1)\int_0^\infty \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)[\mathrm{j}_\ell(kr)]^2 r^2\,\mathrm{d}r \ . \qquad (3.54)$$

Согласно (3.54), амплитуда рассеяния $f(0)$ вещественна. С точки зрения оптической теоремы (3.28) такой результат, на первый взгляд, бессмыслен: мнимая часть амплитуды рассеяния вперед $\mathrm{Im}\,f(0)$ равна нулю, а полное сечение σ, конечно, нет. Правда, если фазы рассеяния малы, то и мнимые части парциальных амплитуд $\mathrm{Im}\,f_\ell = (2\ell+1)k^{-1}\sin^2\delta_\ell$, интегральные парциальные сечения $\sigma_\ell = (4\pi/k^2)(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell$ квадратичны

относительно δ_ℓ; поэтому можно сказать, что при малых δ_ℓ оптическая теорема выполняется *приближённо* – с точностью до членов, пропорциональных δ_ℓ^2.

Таким образом, условие применимости теории возмущений для фаз – это малость фаз:

$$|\delta_\ell| \ll 1 \quad . \tag{3.55}$$

Приближение (3.53) для фаз при соблюдении требования (3.55) будем называть **борновским приближением для фаз рассеяния**. Согласно (3.53) и (3.55), в этом приближении фазы вычисляются по формуле

$$\delta_\ell^{(\text{в})} = -k \int_0^\infty \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)[\mathrm{j}_\ell(kr)]^2 r^2 \,\mathrm{d}r \quad . \tag{3.56}$$

Она показывает, в частности, что если $V(r)$ везде отрицательно (потенциал притяжения), то все борновские фазы $\delta_\ell^{(\text{в})}$ положительны; формула (3.23) показывает, что в этом случае вся осцилляционная картина внешней волновой функции частицы как бы «подтягивается» в области взаимодействия. При положительном $V(r)$ все борновские фазы отрицательны; волновая функция частицы в этом случае как бы «выталкивается» из области взаимодействия.

Выясним условия, при которых соблюдается требование малости фаз (3.55). Как и в §2.2, рассмотрим два предельных случая: длина волны частицы $\lambda\!\!\!^{-} = k^{-1}$ много больше и много меньше, чем область взаимодействия.

Если $\lambda\!\!\!^{-} \gg d$, т.е. $kd \ll 1$, то, подставляя в (3.56) аппроксимацию (3.30), получаем

$$\left|\delta_\ell^{(\text{в})}\right| = \frac{k^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!!]^2} \frac{2\mu}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty V(r) r^{2\ell+2} \,\mathrm{d}r \right| \approx$$

$$\approx \frac{(kd)^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!!]^2(2\ell+3)}\frac{2\mu|V|d^2}{\hbar^2} \quad , \quad (3.57)$$

где d — средний радиус области взаимодействия, а $|\overline{V}|$ — средняя амплитуда взаимодействия. Известно, что если сферически симметричный потенциал притяжения аппроксимируется прямоугольной ямой, то условие существования в нем связанного состояния — это

$$\frac{2\mu V_0 d^2}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{4} \quad . \quad (3.58)$$

Если же в потенциальной яме имеются два-три уровня, то параметр $\left(2\mu|\overline{V}|d^2\right)/\hbar^2$, которому пропорциональна величина $\left|\delta_\ell^{(\text{в})}\right|$, составляет несколько единиц. Формула (3.57) показывает, что условие применимости борновского приближения (3.55) может выполняться для фаз с большими ℓ и не выполняться для фаз с малыми ℓ. Хуже всего борновское приближение годится для фазы s −волны. С другой стороны, как видно из (3.25), относительный вклад s −волны в амплитуду рассеяния меньше всего при самых малых углах рассеяния. Отсюда следует важный качественный вывод: если энергия частицы и протяженность потенциала конечного радиуса таковы, что $kd \ll 1$, то при рассеянии на малые углы условия применимости борновского приближения всегда в среднем более благоприятны, чем при рассеянии на большие углы.

Если $\lambda\!\!\!^{-} \ll d$, т. е. $kd \ll 1$, то для оценки фаз рассеяния следует подставить в (3.56) аппроксимацию (3.12):

$$\left|\delta_\ell^{(\text{в})}\right| = k\frac{2\mu}{\hbar^2}\left|\int_0^d V(r)\frac{\sin^2(kr-\frac{\ell\pi}{2})}{k^2r^2}r^2\,\mathrm{d}r\right| \approx \frac{\mu|\overline{V}|}{\hbar^2}\frac{d}{k} \ . \quad (3.59)$$

В этом случае условие применимости борновского приближения

$$|\overline{V}| \ll \frac{1}{kd}\frac{\hbar^2 k^2}{\mu} \qquad (3.60)$$

не содержит ℓ и полностью совпадает с тем, что для случая $kd \gg 1$ было получено в § 2.2.

в) Метод фазовых функций.

С точки зрения математики метод фазовых функций представляет собой особый способ решения радиального уравнения Шредингера (3.3), являющегося линейным дифференциальным уравнением второго порядка, или соответствующего ему интегрального уравнения (3.10). Он очень удобен для получения фаз рассеяния, так как по этому методу не требуется сначала вычислять в широкой области радиальные волновые функции задачи рассеяния и уже лишь потом, по их асимптотике, находить фазы. Сводя дело к решению нелинейного дифференциального уравнения первого порядка, метод фазовых функций очень удобен также с точки зрения выполнения численных расчетов на ЭВМ. Ниже мы изложим лишь основную идею этого метода.

Будем отправляться от интегрального уравнения (3.10), куда подставим функции Грина $G_{0,\ell}^{(+)}(E,r,r')$ в форме (3.11). Тогда радиальную функцию $\mathrm{R}_\ell(r)$ можно представить в виде

$$\mathrm{R}_\ell(r) = \mathrm{c}_\ell(r)\,\mathrm{j}_\ell(kr) - \mathrm{s}_\ell(r)\,\mathrm{n}_\ell(kr)\ , \qquad (3.61)$$

где $\mathrm{c}_\ell(r)$ и $\mathrm{s}_\ell(r)$ - две новые вспомогательные функции, определённые соотношениями

$$\mathrm{c}_\ell(r) = i^\ell(2\ell+1) - ik\int_0^r \mathrm{j}_\ell(kr')\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r')\right]\mathrm{R}_\ell(r')r'^2\,\mathrm{d}r' +$$

$$+ k\int_r^\infty \mathrm{n}_\ell(kr')\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r')\right]\mathrm{R}_\ell(r')r'^2\,\mathrm{d}r'\ , \qquad (3.62)$$

$$s_\ell(r) = -k \int_0^r j_\ell(kr') \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} V(r')\right] R_\ell(r') r'^2 \, dr' \quad . \qquad (3.63)$$

Используя (3.29), легко показать, что отношение этих функций при асимптотически больших r дает фазу рассеяния:

$$\operatorname{tg} \delta_\ell = \frac{s_\ell(\infty)}{c_\ell(\infty)} \quad . \qquad (3.64)$$

Фазовой функцией называется функция $\delta_\ell(r)$, определенная соотношением

$$\operatorname{tg} \delta_\ell = \frac{s_\ell(r)}{c_\ell(r)} \quad . \qquad (3.65)$$

Как видно из (3.64), ее предел при $r \to \infty$ есть фаза рассеяния:

$$\lim_{r\to\infty} \delta_\ell(r) = \delta_\ell \quad . \qquad (3.66)$$

Легко убедиться путем непосредственной подстановки выражения (3.65), что фазовая функция $\delta_\ell(r)$ удовлетворяет при всех r уравнению

$$\frac{d\delta_\ell(r)}{dr} = -kr^2 \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)\right] \times$$

$$\times \left[\cos \delta_\ell(r)\, j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell(r)\, n_\ell(kr)\right]^2 \quad , \qquad (3.67)$$

которое надо решать с дополнительным условием:

$$\delta_\ell(r = 0) = 0 \quad . \qquad (3.68)$$

Конечно, для получения предельного значения $\delta_\ell(\infty)$ достаточно интегрировать уравнение (3.67) от нуля до границы области взаимодействия. Это хорошо видно также, если уравнению (3.67) придать вид интегрального уравнения:

$$\delta_\ell(r) = -k \int_0^r \left[\frac{2\mu V(r')}{\hbar^2}\right] \times$$

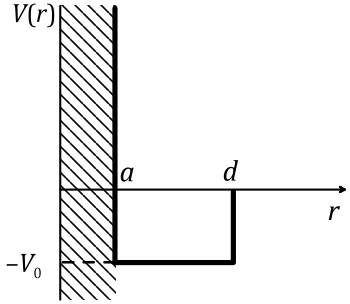
$$\times \left[\cos\delta_\ell(r')\, \mathrm{j}_\ell(kr') - \sin\delta_\ell(r')\, \mathrm{n}_\ell(kr')\right]^2 r'^2\, \mathrm{d}r' \,. \quad (3.69)$$

Уравнения (3.68) и (3.69) раскрывают физический смысл функции $\delta_\ell(r)$: фазовая функция $\delta_\ell(r)$, соответствующая заданному потенциалу $V(r)$, - это фаза рассеяния частицы потенциалом, который «обрезан» в точке r , а на меньших расстояниях совпадает с $V(r)$.

Упражнения

3.1. Найти связь между функцией Грина $G_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и функциями Грина $G_{0,\ell}^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

3.2. Получить общую формулу для фаз рассеяния δ_ℓ частицы потенциальной ямой глубины V_0 радиуса d с бесконечной отталкивающей серединой радиуса a в центре ямы (см. рис.).



3.3. Вычислить борновскую фазу $s-$волны $\delta_0^{(\text{в})}(k)$ при рассеянии частицы прямоугольной потенциальной ямой (3.45). Сравнить с точным решением (3.49). В случае $kd \ll 1$ выяснить, при каком соотношении параметров V_0 и d различие между точным и борновским значениями фазы δ_0 максимально; что означает такое соотношение?

3.4. С помощью уравнения (3.69) для фазовых функций получить формулу борновского приближения для фаз.

3.5. Пользуясь методом фазовых функций, показать, что если $V(r)$ везде отрицательно (положительно), то не только борновская фаза δ_ℓ, но и точно значение фазы δ_ℓ положительны (отрицательны).

3.6. Используя соотношения (3.2) и (3.23), показать, что

волновую функцию $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ можно записать в виде

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)\mathrm{e}^{i\delta_\ell}\,\widetilde{\mathrm{R}}_\ell(r)\,\mathrm{P}_\ell(\hat{\mathbf{n}}_k\,\hat{\mathbf{n}}_r) \quad , \qquad (3.70)$$

где $\widetilde{\mathrm{R}}_\ell(r)$ - вещественное решение уравнения (3.3) с асимптотикой

$$\widetilde{\mathrm{R}}_\ell(r)|_{r\to\infty} = \frac{1}{r}\sin(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell)$$

Показать, что тогда для волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ справедливо выражение:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)\mathrm{e}^{-i\delta_\ell}\,\widetilde{\mathrm{R}}_\ell(r)\,\mathrm{P}_\ell(\hat{\mathbf{n}}_k\,\hat{\mathbf{n}}_r) \quad . \qquad (3.71)$$

Лекция 4. Рассеяние при низких и при высоких энергиях

§ 4.1. Рассеяние при низких энергиях. Длина рассеяния, обобщенная длина рассеяния, эффективный радиус взаимодействия

Разложение по парциальным волнам является и удобным способом приближенного решения задачи рассеяния на сферически-симметричном потенциале, и способом параметризации экспериментальных данных о процессе рассеяния. Согласно соотношению (3.33), при малых энергиях частиц вклад высших парциальных волн в амплитуду рассеяния быстро падает с ростом ℓ. Если $kd \ll 1$, то достаточно знать лишь несколько первых фаз δ_ℓ, а в пределе $k \to 0$ вообще лишь фазу $s-$волны δ_0, чтобы хорошо описать процесс рассеяния. На этом основан так называемый **фазовый анализ рассеяния**, который, будучи модельно независимым способом параметризации амплитуды рассеяния, широко применяется в разных областях физики. Как видно из (3.25), (3.26), характерным

признаком процесса рассеяния в условиях $kd \ll 1$ («длинноволновое приближение») является малая (а в пределе $k \to 0$ вообще исчезающая) угловая анизотропия рассеяния.

Перейдем к описанию процесса рассеяния при предельно малых энергиях, когда достаточно ограничиться взаимодействием частицы с силовым центром в s −состоянии.

Из (3.33) следует, что при $E \to 0$ фаза s −волны $\delta_0(k)$ пропорциональна импульсу частицы k. Соответствующий коэффициент пропорциональности является единственным параметром, через которые выражаются все характеристики процесса рассеяния при малых энергиях частицы. Определим **длину рассеяния** предельным соотношением

$$a = \lim_{E \to 0} \left(-\frac{\delta_0(k)}{k} \right) \quad . \tag{4.1}$$

Подставляя (4.1) в (3.25), а также учитывая, что при $k \to 0$ все фазы δ_ℓ с $\ell \neq 0$ стремятся к нулю быстрее, чем δ_0, получаем

$$f|_{E \to 0} = -a \quad , \tag{4.2}$$

т.е. длина рассеяния есть амплитуда рассеяния (с обратным знаком) в пределе нулевой энергии частицы. При этом

$$\sigma|_{E \to 0} = 4\pi a^2 \quad . \tag{4.3}$$

Что говорят величина и знак длины рассеяния о характере взаимодействия частицы с силовым центром? Для ответа на этот вопрос рассмотрим, каков с точки зрения профиля волновой функции «геометрический» смысл длины рассеяния. Во внешней области $(r > d)$ волновая функция, описывающая s −рассеяние частиц, имеет, согласно (3.41), вид

$$u_0(r) = rR_0(r) = \text{const} \cdot \sin(kr + \delta_0) \ , r > d \ ; \tag{4.4}$$

при этом мы выразили сферическую функцию Бесселя и сферическую функцию Неймана через тригонометрические функции:

$$\mathrm{j}_0(x) = \frac{\sin x}{x}\ ; \quad \mathrm{n}_0(x) = -\frac{\cos x}{x}\ . \qquad (4.5)$$

Распространим выражение (4.4) и на внутреннюю область:

$$v_0(r) = \mathrm{const} \cdot \sin(kr + \delta_0)\,, \qquad r - \text{любое}\,. \qquad (4.6)$$

При $k \to 0$ и малых r функция $v_0(r)$ — прямая линия:

$$v_0(r)\big|_{\,k\to 0} \approx \mathrm{const} \cdot k(r-a)\ . \qquad (4.7)$$

Таким образом, значение длины рассеяния a — это координата точки, в которой пересекается с осью абсцисс касательная к функции $v_0(r)$, если построить эту функцию при $k \to 0$ (точнее при выполнении двух условий: $kr \ll 1$ и $|ka| \ll 1$). Геометрический смысл длины рассеяния виден из рис. 4.1. Здесь показаны три ситуации, возможные при сшивании внутренней и внешней волновых функций по «границе» области взаимодействия. Случай А относится к потенциалу отталкивания, случаи Б и В — к потенциалу притяжения; во всех случаях d — средний радиус взаимо-

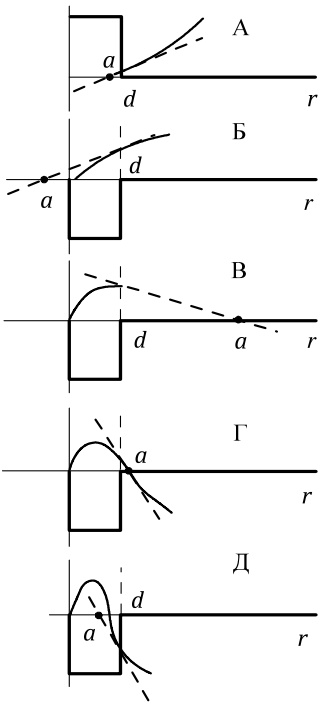


Рис. 4.1. Профиль волновой функции и длина рассеяния частицы.

действия.

В случае А и В длина рассеяния a положительна. Однако в случае А ($0 < a < d$) волновая функция $\mathrm{u}(r)$ «выталкивается» из внутренней области (отталкивание частицы силовым центром), а в случае В ($a > d$) она «втягивается» в неё (притяжение). Добавим, что в случае А волновая функция $\mathrm{u}_0(r)$ ведёт себя во всей внешней области $r > d$ так же, как при рассеянии частицы абсолютно твердой (отталкивающей) сферой, радиус которой равен a.

В случае Б длина рассеяния a отрицательна (фаза положительна). Из рисунка видно, что в этом случае волновая функция также «втягивается» в область взаимодействия, но значительно слабее, чем в случае В: поведение функций $\mathrm{u}_0(r)$ и функции $v_0(r)$ во внутренней области не так сильно различается между собой в случае Б, как в случае В. Переход от одной ситуации к другой легко понять, предположив, что, отправляясь от случая Б мы постепенно увеличиваем амплитуду взаимодействия частицы с силовым центром. При этом будет возрастать скорость осцилляции волновой функции $\mathrm{u}_0(r)$ во внутренней области, и при каком-то значении амплитуды взаимодействия, где-то в районе $r = d$ возникнет максимум функции $\mathrm{u}_0(r)$, так что наклон функции $v_0(r)$ изменится на противоположный (длина рассеяния a изменит знак): мы перешли к случаю В. Нетрудно предположить, что такой переход должен быть сопряжен с качественным изменением и каких-то других свойств системы.

Действительно, при переходе от ситуации Б к ситуации В в яме возникает связанное состояние частицы. Рассмотрим случай, когда энергия связи ε_b такого только что возникшего связанного состояния еще очень мала:

$$\varepsilon_b \ll \left|\overline{V}\right| \ , \qquad (4.8)$$

здесь $\overline{V}$ — средняя глубина взаимодействия. Пусть $\mathrm{u}_b(r) = r\mathrm{R}_b(r)$ — волновая функция этого состояния. Её поведение во внешней области не зависит от характера потенциала:

$$\mathrm{u}_b(r) \sim \mathrm{e}^{-\varkappa r}, r > d \quad , \tag{4.9}$$

где $\varkappa = \sqrt{2\mu\varepsilon_b}/\hbar$. Сравним волновую функцию $\mathrm{u}_b(r)$ с волновой функцией $\mathrm{u}_0(r)$, описывающей процесс рассеяния на том же потенциале при очень малых энергиях. Очевидно, что форма этих двух функций во внутренней области ($r < d$) при $\varepsilon_b \to 0$ и $k \to 0$ одна и та же. А это значит, что и логарифмические производные этих двух функций на границе внутренней и внешней областей также совпадают:

$$\left.\frac{\mathrm{u}_0{}'}{\mathrm{u}_0}\right|_{r=d} = \left.\frac{\mathrm{u}_b{}'}{\mathrm{u}_b}\right|_{r=d} \quad . \tag{4.10}$$

Подставляя сюда $\mathrm{u}_0(r)$ из (4.4), а $\mathrm{u}_b(r)$ из (4.9), получаем при $k \to 0$

$$k \cdot \mathrm{ctg}(\delta_0)\,|_{k\to 0} = -\varkappa \quad , \tag{4.11}$$

или в соответствии с (4.1)

$$a = \frac{1}{\varkappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu\varepsilon_b}} \quad . \tag{4.12}$$

Итак, если в потенциальной яме имеется слабо связанное *s*-состояние, длина рассеяния частицы такой ямы положительна, а её величина a полностью определяется энергией связи частицы.

Приведенные выше рассуждения относительно перехода от ситуации Б к ситуации В, изображенных на рис. 4.1, полезно продолжить. Проследим за изменением профиля волновой функции $\mathrm{u}_0(r)$ при дальнейшем увеличении амплитуды взаимодействия (глубина ямы). Переход от случая В к случаю Г сопровождается непре-

рывным уменьшением длины рассеяния. Далее (случай Д) длина рассеяния попадает в интервал $0 < a < d$. Это происходит одновременно с тем, как нуль функции $u_0(r)$, который в случае Б — Г находится где-то справа от d, перемещается во внутреннюю область. При дальнейшем увеличении глубины ямы длина рассеяния проходит через нуль, и возникает ситуация, сходная со случаем Б.

Таким образом, по мере непрерывного увеличения глубины ямы происходит циклическое изменение параметра сшивания внутренней и внешней волновых функций задачи рассеяния, а вместе с ними — и величины и знака длины рассеяния. Завершению каждого «цикла» сопутствует появлению в яме нового связанного состояния.

Рассмотренные выше случаи Б, В, Г, Д относились к потенциалу притяжения, а случай А — к потенциалу отталкивания. Заметим, однако, что поведение функции $v_0(r)$ во внешней области в случае Д сходно с тем, что происходит в случае А (изменение знака всей функции, конечно, несущественно). Другими словами, если в яме притяжения существует связанное состояние, то может случиться, что при $k \to 0$ $s-$волна искажается (во внешней области) этой ямой так же, как потенциалом отталкивания.

Пример: $s-$рассеяние на прямоугольной яме.

Задача $s-$рассеяния на прямоугольной яме — одна из немногих, когда без численных расчетов удается получить точные результаты для фазы и всех других характеристик рассеяния. Мы воспользуемся этим случаем, чтобы проиллюстрировать общие выводы, сделанные выше.

Пусть V_0 — глубина, а d — радиус прямоугольной ямы. Число связанных $s-$состояний N_s в такой яме определяется неравенством [1, с. 121]

$$\frac{k_0 d}{\pi} - \frac{1}{2} < \mathrm{N}_s < \frac{k_0 d}{\pi} + \frac{1}{2} \quad , \qquad (4.13)$$

где

$$k_0 = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} \quad . \qquad (4.14)$$

Таким образом, первое связанное состояние появляется при $k_0 d > \pi/2$, n-е — при $k_0 d > (\mathrm{n} - 1/2)\pi$.

Фазу s-волны при рассеянной частице такой ямы легко получить из (3.49):

$$\operatorname{tg} \delta_0(k) = \frac{k \operatorname{tg} Kd - K \operatorname{tg} kd}{k \operatorname{tg} Kd \cdot \operatorname{tg} kd + K} \quad , \qquad (4.15)$$

где, согласно (3.47), $K = \sqrt{2\mu\,(V_0 + E)/\hbar^2}$. Отсюда получаем для длины рассеяния

$$a = d - \frac{1}{k_0} \operatorname{tg} Kd \quad . \qquad (4.16)$$

На рис. 4.2 видны диапазоны изменения длины рассеяния a в разных интервалах величины Kd. Решая трансцендентное уравнение $x - \operatorname{tg} x = 0$, получаем, что длина рассеяния обращается в нуль в точках $Kd = 0$; 4,49; 7,76 и т.д. Слева от каждой из них на рисунке обозначены интервалы величины Kd, где a заключено в пределах $0 < a < d$; здесь внешняя волновая функция такая же, как при рассеянии на бесконечном отталкивающем потенциале. В точках $Kr =$

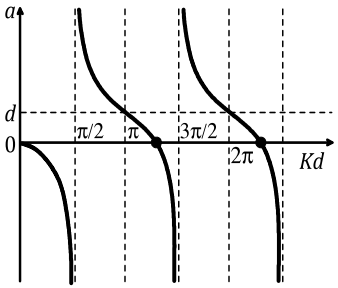


Рис. 4.2. Длина рассеяния частицы прямоугольной ямой в зависимости от параметров ямы.

$\pi/2$, $3\pi/2$, $5\pi/2$ и т.д. длина рассеяния меняется скачком от $a = -\infty$ до $a = +\infty$. Из (4.13) видно, что как раз при переходе величины Kr, через эти точки в яме возникают новые связанные состояния.

До сих пор мы интересовались лишь рассеянием в пределе $k \to 0$, а формулой (4.15), справедливой при любом k, воспользовались лишь как вспомогательной. Теперь обратимся к описанию s −рассеяния при ненулевых, хотя и малых, энергиях.

Введём понятие **обобщённой длины рассеяния**:

$$\frac{1}{a(k)} \equiv -k \cdot \operatorname{ctg} \delta_0(k) \quad . \tag{4.17}$$

Очевидно, в пределе $k \to 0$ обобщённая длина рассеяния $a(k)$ превращается в длину рассеяния a. Представим правую часть выражения (4.17) в виде разложения по степеням k. Из соотношений (3.10) и (3.29) видно, что $1/a(k)$ — это четная функция k, поэтому ее разложение содержит только четные степени k. При малых k проходит следующая параметризация обобщённой длины рассеяния:

$$\frac{1}{a(k)} = \frac{1}{a} - \frac{1}{2} r_0 k^2 + \mathrm{o}(k^4) \quad , \tag{4.18}$$

где $\mathrm{o}(k^4)$ − член разложения высшего порядка, который мы отбросим. Параметр r_0 носит название эффективного радиуса потенциала взаимодействия.

Таким образом, длина рассеяния a и эффективный радиус r_0 являются двумя независимыми параметрами, через которые можно выразить фазу s −волны во всей области малых энергий частицы. Это утверждение справедливо для потенциала конечного радиуса, имеющего произвольную форму. Отсюда следует, в частности, что если изучать экспериментально рассеяние частицы потенциалом лишь при малых энергиях — в области применимости разложения (4.18), то нельзя получить

более детальную информацию о форме потенциала, чем ее может дать простейшая модель прямоугольной ямы.

§ 4.2. Рассеяние при высоких энергиях. Эйкональное приближение.

Перейдем к описанию потенциального рассеяния в противоположном случае высоких энергий налетающих частиц. Пусть дебройлевская длина волны частицы будет много меньше, чем размеры области взаимодействия:

$$\lambda\!\!\!^{-} \ll d; \;\; kd \gg 1 \quad . \qquad (4.19)$$

В этом случае параметризация амплитуды рассеяния с помощью фаз, конечно, не подходит, так как в процессе рассеяния участвует очень большое число парциальных волн. Однако и борновское приближение, общие условия применимости которого выражаются неравенством (2.13), также не всегда годится. В этой ситуации нужны особые приближенные методы. Мы увидим, что рассеяние частиц потенциалом в условиях очень малой длины волны частицы обнаруживает большое сходство с дифракцией плоской волны, как она рассматривается в оптике. Вместе с этим в квантовую теорию рассеяния естественным образом проникают термины, присущие классической механике, — прицельный параметр, траектория движения частицы. На этой основе и удается сформулировать очень эффективный приближенный метод, который имеет много разных названий — **дифракционное приближение, эйкональное приближение**, приближение Мольера и др. — и широко применяется в разных разделах физики — от атомной физики до физики элементарных частиц.

Рассмотрим рассеяние частиц потенциалом конечного радиуса $V(\mathbf{r})$; при этом, в отличие от § 4.1, не требуется, чтобы этот потенциал был сферически-симметричным.

В эйкональном приближении решение уравнения

Шредингера ищется в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{ikz}\varphi(\mathbf{r}) \quad , \tag{4.20}$$

где $\varphi(\mathbf{r})$ — функция, удовлетворяющая граничному условию:

$$\varphi(\mathbf{r})|_{z\to-\infty} = 1 \quad . \tag{4.21}$$

Подставляя (4.20) в уравнение. Шредингера (1.4), получаем уравнение для функции $\varphi(\mathbf{r})$:

$$i\frac{k\hbar^2}{\mu}\frac{\partial\varphi}{\partial z} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2\varphi = V\varphi \quad . \tag{4.22}$$

Далее, функция $\varphi(\mathbf{r})$ считается столь медленно изменяющейся, что вкладом вторых производных можно пренебречь. Тогда уравнение (4.22) принимает вид:

$$i\frac{k\hbar^2}{\mu}\frac{\partial\varphi}{\partial z} = V\varphi \quad . \tag{4.23}$$

Интегрируя это уравнение с учетом граничного условия (4.21), находим

$$\varphi(x,y,z) = \exp\left[-\frac{i\mu}{k\hbar^2}\int\limits_{-\infty}^{z} V(x,y,z')\,dz'\right] . \tag{4.24}$$

Согласно (1.34), амплитуда рассеяния на потенциале $V(\mathbf{r})$ есть

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}V(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3r \quad , \tag{4.25}$$

где $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ — решение уравнения Шрёдингера, соответствующее импульсу падающих частиц $\mathbf{k}$. В эйкональном приближении, согласно (4.20) и (4.24)

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \exp\left[i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{i\mu}{\hbar^2 k}\int\limits_{-\infty}^{z} V(\mathbf{b}+\hat{\mathbf{k}}z')\,\mathrm{d}z'\right] \quad , \tag{4.26}$$

где введен единичный вектор в направлении импульса падающих частиц:

$$\hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k} \tag{4.27}$$

и проекция $\mathbf{b}$ вектора $\mathbf{r}$ на плоскость, перпендикулярную вектору $\mathbf{k}$:

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} + \hat{\mathbf{k}}z \quad . \tag{4.28}$$

Подставляя (4.26) в (4.25), получаем:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{i\mu}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^{z} V(\mathbf{b} + \hat{\mathbf{k}}z')\, \mathrm{d}z'\right] \mathrm{d}^3 r \ , \tag{4.29}$$

где, как обычно,

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}', \qquad q \approx 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \ , \tag{4.30}$$

θ – угол рассеяния. Используя (4.28) и (4.30), находим:

$$\mathbf{q}\mathbf{r} = \mathbf{q}\mathbf{b} + 2kz \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \ , \tag{4.31}$$

а при малых углах рассеяния, когда вектор $\mathbf{q}$ практически перпендикулярен вектору $\mathbf{k}$, получаем

$$\mathbf{q}\mathbf{r} \approx \mathbf{q}\mathbf{b} \quad . \tag{4.32}$$

Подставляя (4.32) в (4.29) и записывая элемент объема в виде:

$$\mathrm{d}^3 r = \mathrm{d}^2 b \, \mathrm{d}z \ , \tag{4.33}$$

где $\mathrm{d}^2 b$ — элемент площади в плоскости, перпендикулярной вектору $\mathbf{k}$, интегрируем по z:

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}}\left(1 - \mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})}\right)\mathrm{d}^2 b \quad , \qquad (4.34)$$

$$\chi(\mathbf{b}) \equiv -\frac{\mu}{k\hbar^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} V(\mathbf{b} + \hat{\mathbf{k}}z)\,\mathrm{d}z \quad . \qquad (4.35)$$

Полученная формула для амплитуды рассеяния аналогична формуле для амплитуды, описывающей в оптике дифракцию Фраунгофера. Пользуясь этой оптической аналогией, можно назвать функцию $\chi(\mathbf{b})$ **эйконалом**, а выражение (4.34) **эйкональным приближением** для амплитуды рассеяния. Из формулы (4.35) видно, что функция $\chi(\mathbf{b})$ есть интеграл от потенциала по прямой, параллельной вектору $\mathbf{k}$ и проходящей на расстоянии $|\mathbf{b}|$ от начала координат. Поэтому величину $\mathbf{b}$ можно назвать вектором прицельного параметра этой прямолинейной траектории. Тогда амплитуду (4.34) можно рассматривать как интеграл по множеству таких прямолинейных траекторий со всевозможными значениями прицельного параметра.

Функция

$$\Gamma(\mathbf{b}) = 1 - \mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})} \quad , \qquad (4.36)$$

однозначно определяемая эйконалом $\chi(\mathbf{b})$ и связанная двумерным преобразованием Фурье с эйкональной амплитудой рассеяния:

$$f(\mathbf{q}) = \frac{ik}{2\pi}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}}\Gamma(\mathbf{b})\,\mathrm{d}^2 b \quad ,$$

$$\Gamma(\mathbf{b}) = \frac{1}{2\pi ik}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q'b}} f(\mathbf{q'})\,\mathrm{d}^2 q' \ , \qquad (4.37)$$

называется **профильной функцией** взаимодействия. Она играет важную роль в теории дифракционного рассеяния частиц на составных системах (см. лекцию 15).

Если потенциал $V(\mathbf{r})$ является азимутально-симметричным, т.е. не зависит от направления вектора $\mathbf{b}$, то выражение (4.34) для амплитуды можно упростить. При малых углах рассеяния, когда вектор $\mathbf{q}$ лежит в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{k}$, можем записать $\mathbf{qb} = qb\cos\varphi$, где φ — азимутальный угол вектора $\mathbf{b}$, отсчитываемый относительно направления вектора $\mathbf{q}$. При этом $\mathrm{d}^2 b = b\,\mathrm{d}b\,\mathrm{d}\varphi$. Используя интегральное представление цилиндрической функции Бесселя:

$$\mathrm{J}_0(\chi) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{i\chi\cos\varphi}\mathrm{d}\varphi \quad , \tag{4.38}$$

получаем из (4.34) в случае азимутально-симметричного потенциала

$$f(\theta) = ik\int_0^{\infty} \mathrm{J}_0(qb)(1-\mathrm{e}^{i\chi(b)})b\,\mathrm{d}b \quad . \tag{4.39}$$

Эта амплитуда не зависит от направления переданного импульса $\mathbf{q}$. Амплитуда рассеяния в эйкональном приближении существенно отлична от нуля только для малых углов рассеяния. Из (4.35) видно, что $\chi(\mathbf{b})$ обращается в нуль при $b \geq d$. Поэтому существенной областью интегрирования в (4.34) является $0 \leq b \lesssim d$. Считая, что $\exp(i\chi(\mathbf{b}))$ плавно изменяется во внутренней области, видим, что ввиду осцилляций экспоненты $\exp(i\mathbf{qb})$ амплитуда (4.34) существенно отлична от нуля только в том случае, если

$$qd \lesssim 1 \quad . \tag{4.40}$$

Подставляя сюда (4.30) и учитывая (4.19), получаем, что это условие можно записать в виде

$$\theta \lesssim \frac{1}{kd} \ll 1 \quad . \tag{4.41}$$

Таким образом, согласно эйкональному приближению, при высоких энергиях рассеяние сосредоточено в узком конусе, ось которого совпадает с направлением импульса бомбардирующих частиц, а угол раствора характеризуется величиной $1/(kd)$.

§ 4.3. Сравнение эйконального и борновского приближений. Условия применимости эйконального приближения

В § 3.4 мы отмечали, что амплитуда рассеяния в борновском приближении не удовлетворяет оптической теореме: действительно, при $\theta = 0$ она всегда вещественна. Получим $f^{(\mathrm{B})}(0) = -[\mu/(2\pi\hbar^2)]\int V(\mathbf{r})\mathrm{d}^3 r$, тогда как, согласно (3.28), мнимая часть амплитуды рассеяния вперед может обращаться в нуль только вместе с полным сечением взаимодействия, что практически невозможно. Покажем, что амплитуда рассеяния, рассчитанная в эйкональном приближении, лишена такого дефекта. Для этого, пользуясь выражением (4.34), рассчитаем в эйкональном приближении полное сечение σ. Переходя, по аналогии с (2.22), от интегрирования по направлениям, рассеяния к интегрированию по переданному импульсу:

$$\mathrm{d}\Omega = \frac{\mathrm{d}^2 q}{k^2} = \frac{q\,\mathrm{d}q\mathrm{d}\varphi}{k^2}$$

и используя интегральное представление δ-функции от двух переменных:

$$\delta(\mathbf{b}-\mathbf{b}') = \frac{1}{(2\pi)^2}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{b}-\mathbf{b}')}\,\mathrm{d}^2 q$$

Получаем:

$$\sigma = \frac{1}{(2\pi)^2}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{b}-\mathbf{b}')}\left(1-\mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})}\right)\left(1-\mathrm{e}^{-i\chi(\mathbf{b}')}\right)\mathrm{d}^2 b\mathrm{d}^2 b'\,\mathrm{d}^2 q =$$

$$= \int\left|1-\mathrm{e}^{i\chi(\mathbf{b})}\right|^2\mathrm{d}^2 b = 2\int[1-\cos\chi(\mathbf{b})]\,\mathrm{d}^2 b\ ;$$

здесь мы учли также, что при любом вещественном $V(\mathbf{r})$ эйконал $\chi(\mathbf{b})$ является вещественной величиной. С другой стороны, для мнимой части амплитуды рассеяния вперед имеем

$$\mathrm{Im} f(\mathbf{k}=\mathbf{k}') = \frac{k}{2\pi}\int [1-\cos\chi(\mathbf{b})]\,\mathrm{d}^2 b \quad .$$

Сравнивая два последних выражения между собой, видим, что они удовлетворяют оптической теореме (3.28). Это является свидетельством внутренней последовательности, самосогласованности эйконального приближения в теории потенциального рассеяния.

Чтобы выяснить условия применимости эйконального приближения, вернемся к соотношениям (4.22), (4.23), от которых мы отправлялись при получении выражения (4.34). Переход от первого из них ко второму возможен, если во всей области взаимодействия $r < d$ справедливо неравенство

$$\left|\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2\varphi\right| \ll |V\varphi| \quad . \qquad (4.42)$$

Тогда $\varphi(\mathbf{r})$ имеет вид (4.24). Рассмотрим вместо (4.42) другое неравенство

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left|\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right| \ll |V\varphi| \quad , \qquad (4.43)$$

считая, что требование (4.42) предъявляется к $V(\mathbf{r})$ и $\varphi(\mathbf{r})$, так сказать, в среднем, и включает в себя (4.43). Подставляя $\partial\varphi/\partial z$ из (4.23), получаем

$$\left|\frac{\partial}{\partial z}(V\varphi)\right| \ll k|V\varphi| \quad , \qquad (4.44)$$

или, если снова использовать (4.23)

$$\left|\frac{\partial V}{\partial z}\varphi + \frac{\mu}{ik\hbar^2}V\varphi\right| \ll k|V\varphi| \quad , \qquad (4.45)$$

что ведет к двум неравенствам, которые должны выполняться одновременно (опять-таки, по крайней мере, в среднем):

$$\left|\frac{\partial V}{\partial z}\right| \ll kV \quad , \tag{4.46}$$

$$|V| \ll \frac{\hbar^2 k^2}{\mu} \ . \tag{4.47}$$

Первое из них (если ограничиться потенциалами, не имеющими резких спадов и подъемов) эквивалентно требованию $1/d \ll k$, которое в формуле (4.19) уже было нами использовано при разработке эйконального приближения. Второе означает, что средний потенциал взаимодействия $\left|\overline{V}\right|$ должен быть много меньше кинетической энергии налетающих частиц E. Вспомним также, что при переходе от (4.24) к (4.34) мы сделали еще предположение о малости углов рассеяния.

Таким образом, условия применимости эйконального приближения формулируются в виде трех требований:

$$kd \gg 1, \ \theta \ll 1, \ \left|\overline{V}\right| \ll E \quad . \tag{4.48}$$

Отметим, имея в виду большую величину kd, что последнее из этих требований гораздо менее жестко, чем условие применимости борновского приближения (2.13): $\left|\overline{V}\right| \ll E/(kd)$. Если же выполняется не только условие (4.48), но и условие (2.13), то выражение (4.34) для амплитуды рассеяния, полученное в эйкональном приближении, переходит в борновскую амплитуду рассеяния (2.6) (см. упр. 4.3).

Упражнения:

4.1. Вычислить длину рассеяния частицы прямоугольной потенциальной ямой с бесконечной отталкивающей

сердцевиной в центре ямы.

4.2. Вычислить эффективный радиус r_0 прямоугольной потенциальной ямы. Сравнить зависимость r_0 от глубины и радиуса ямы с зависимостью длины рассеяния a от этих параметров.

4.3. Показать, что при условии $|\overline{V}| \ll E/(kd)$ эйкональная амплитуда рассеяния (4.34) переходит в борновскую амплитуду (2.6).

4.4. При высоких энергиях амплитуда упругого рассеяния адронов нуклонами часто аппроксимируется выражением

$$f(q) = \frac{ik\sigma(1-i\beta)}{4\pi}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha q^2} \quad , \qquad (4.49)$$

где σ, β и α — параметры, не зависящие от переданного импульса q. Вычислить профильную функцию адрон-нуклонного взаимодействия $\Gamma(b)$.

4.5. Вычислить эйконал и профильную функцию для частицы, рассеиваемой прямоугольной сферически-симметричной ямой.

Лекция 5. Кулоновское рассеяние

§ 5.1. Особенности задачи о кулоновском рассеянии

Полученные до сих пор результаты относились к рассеянию на потенциалах конечного радиуса. Если при $r \to \infty$ потенциал $V(r)$ спадает быстрее, чем центробежная энергия частицы $\hbar^2\ell(\ell+1)/2\mu r^2$, то асимптотическое решение радиального уравнения Шредингера (3.3) или (3.34) имеет вид синусоиды (3.37), т.е. представляет собой суперпозицию сходящейся и расходящейся сферических волн свободной частицы. Если же подставить в уравнение Шредингера в качестве $V(r)$ потенциальную энергию взаимодействия двух точечных зарядов (1.30):

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{u}_\ell}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{\mathrm{Z}_1\mathrm{Z}_2 e^2}{r}\right]\mathrm{u}_\ell = 0 \quad , \qquad (5.1)$$

то при $r \to \infty$ мы не получаем волнового уравнения для свободной частицы. Вместо него мы имеем уравнение

$$\frac{\mathrm{d}^2 \mathrm{u}_\ell}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\mathrm{Z}_1 \mathrm{Z}_2 e^2}{r}\right]\mathrm{u}_\ell = 0 \quad , \tag{5.2}$$

решение которого никогда не переходит в синусоиду (3.37). Прямой подстановкой легко убедиться в том, что асимптотическое решение уравнения (5.2) можно построить из двух функций

$$\mathrm{u}_\ell(r)|_{r\to\infty} \sim \mathrm{e}^{\pm i(kr - \mathrm{n}\ln(kr))} \quad , \tag{5.3}$$

где k - импульс частицы, а n - безразмерный параметр, который зависит от зарядов Z_1, Z_2 и скорости v налетающей частицы:

$$\mathrm{n} = \frac{\mu \mathrm{Z}_1 \mathrm{Z}_2 e^2}{\hbar^2 k} = \mathrm{Z}_1 \mathrm{Z}_2 \frac{e^2}{\hbar v} = \frac{\mathrm{Z}_1 \mathrm{Z}_2}{137}\left(\frac{v}{c}\right)^{-1} \quad , \tag{5.4}$$

(здесь мы воспользовались постоянной точной структуры $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$, чтобы выразить n через отношение скорости частицы v к скорости света c). Таким образом, при любом n асимптотическое выражение для решений уравнения (5.1) содержит логарифмическую добавку к фазе.

Оказывается, решение уравнения (5.1) в задаче кулоновского рассеяния (так же, как и его решение для дискретного спектра частицы в кулоновском поле притяжения) можно выразить через вырожденную гипергеометрическую функцию $F(a, b, z)$. Для этого надо сделать подстановку

$$\mathrm{u}_\ell(r) = r\mathrm{R}_\ell(r) = r^{\ell+1}\mathrm{e}^{ikr} f_\ell(r) \ . \tag{5.5}$$

Уравнение для функции $f_\ell(r)$:

$$r\frac{\mathrm{d}^2 f_\ell}{\mathrm{d}r^2} + [2ikr + 2(\ell+1)]\frac{\mathrm{d}f_\ell}{\mathrm{d}r} +$$

$$+[2ik(\ell+1)-2\mathrm{n}k]f_\ell=0 \quad (5.6)$$

и есть уравнение для вырожденной гипергеометрической функции:

$$z\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}F(a,b,z)+(b-z)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}F(a,b,z)-$$

$$-aF(a,b,z)=0\ . \quad (5.7)$$

Будем обозначать символами $F(a,b,z)$ и $G(a,b,z)$ соответственно регулярное и нерегулярное в нуле решения вырожденного гипергеометрического уравнения (5.7). Приведем их некоторые свойства [4]:

$$F(a,b,z)|_{z\to 0}=1+\frac{a}{b}\frac{z}{1!}+\frac{a(a+1)}{b(b+1)}\frac{z^2}{2!}+\cdots\ , \quad (5.8)$$

$$F(a,b,z)|_{z\to\infty}=\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}(-z)^{-a}\left[1+\frac{a(a-b+1)}{-z}\right]+$$

$$+\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}e^z z^{a-b}+\cdots\ , \quad (5.9)$$

$$G(a,b,z)|_{z\to 0}\sim z^{1-b}, \quad (5.10)$$

$$G(a,b,z)|_{z\to\infty}=1+\frac{ab}{1!\,z}+\frac{a(a+1)b(b+1)}{2!\,z^2}+\cdots; \quad (5.11)$$

здесь $\Gamma(a)$ - Г −функция.

Общее решение уравнения (5.6), а следовательно, и уравнения (5.1) есть комбинация соответствующих линейно независимых решений:

$$\mathrm{u}_\ell(r)=r^{\ell+1}\mathrm{e}^{ikr}\{C_\ell F(\ell+1+i\mathrm{n};2\ell+2;-2ikr)+$$

$$+D_\ell G(\ell+1+i\mathrm{n};2\ell+2;-2ikr)\}\equiv$$

$$\equiv C_\ell F_\ell(r)+D_\ell G_\ell(r). \quad (5.12)$$

где C_ℓ и D_ℓ — произвольные константы. Входящие сюда функции

$$F_\ell(r) \equiv r^{\ell+1}\mathrm{e}^{ikr}F(\ell+1+i\mathrm{n};2\ell+2;-2ikr)\,, \quad (5.13)$$

$$G_\ell(r) \equiv r^{\ell+1}\mathrm{e}^{ikr}G(\ell+1+i\mathrm{n};2\ell+2;-2ikr)\,, \quad (5.14)$$

называются регулярной и нерегулярной *кулоновскими волновыми функциями частицы*. Их поведение при больших r следует из (5.9) и (5.11):

$$F_\ell(r)|_{r\to\infty} \sim \sin(kr - \frac{\ell\pi}{2} - \mathrm{n}\ln(2kr) + \sigma_\ell)\,, \quad (5.15)$$

$$G_\ell(r)|_{r\to\infty} \sim \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} - \mathrm{n}\ln(2kr) + \sigma_\ell\right), \quad (5.16)$$

где введено обозначение

$$\sigma_\ell = \arg\Gamma(\ell+1+i\mathrm{n})\,. \quad (5.17)$$

Условие (3.36) $\mathrm{u}_\ell(0)=0$, которое мы должны наложить на волновую функцию частицы, отбирает из (5.12) решения, ведущие себя в нуле регулярным образом: $D_\ell = 0$. Таким образом, волновая функция частицы, рассеиваемой кулоновским потенциалом, дается бесконечным рядом:

$$\psi_\mathrm{c}(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\mathrm{u}_\ell(r)}{r}\,\mathrm{P}_\ell(\cos\theta) = \\ = \frac{1}{r}\sum_{\ell=0}^{\infty}\mathrm{C}_\ell F_\ell\,(r)\mathrm{P}_\ell(\cos\theta). \quad (5.18)$$

Если коэффициент C_ℓ выбрать согласно формуле

$$\mathrm{C}_\ell = \frac{(2ik)^\ell \mathrm{e}^{-\mathrm{n}\frac{\pi}{2}}\Gamma(\ell+1+i\mathrm{n})}{(2\ell)!}\,, \quad (5.19)$$

то при $r\to\infty$ волновая функция $\psi_\mathrm{c}(r)$ приобретает вид, сходный с асимптотикой волновой функции частицы,

рассеиваемой потенциалом конечного радиуса (соотношение (1.33)):

$$\psi_c(r)|_{r\to\infty} = e^{i[kz+n\ln k(r-z)]} + f_c(\theta)\frac{e^{i[kr-n\ln(2kr)]}}{r}, \quad (5.20)$$

При этом $f_c(\theta)$ — **амплитуда кулоновского рассеяния** — дается выражением

$$f_c(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_\ell (2\ell+1)(e^{2i\sigma_\ell}-1)P_\ell(\cos\theta) =$$

$$= \frac{1}{2ik}\sum_\ell (2\ell+1)\left(\frac{\Gamma(\ell+1+in)}{\Gamma(\ell+1-in)}-1\right)P_\ell(\cos\theta)\,. \quad (5.21)$$

Читателю предлагается самостоятельно, используя (5.15), а также известное свойство Γ −функции $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$, получить соотношения (5.20) и (5.21).

Первый член в (5.20) характеризует падающую, второй — рассеянную волну. В отличие от (1.33) обе они искажены логарифмическими фазовыми множителями; здесь проявляется дальнодействующий характер кулоновских сил. Однако это искажение не является, существенным при вычислении плотности потоков падающих и рассеянных частиц на больших расстояниях от кулоновского центра; эти выражения понадобятся нам при вычислении дифференциального сечения кулоновского рассеяния. Найдем, например, плотность потока падающих частиц. Для этого, используя прием, который мы уже применяли в § 1.3, подставим в общую формулу (1.37) для плотности тока первое слагаемое волновой функции (5.20):

$$j_{in}|_{r\to\infty} = \hbar k/\mu \quad (5.22)$$

(исключение составляет лишь рассеяние непосредственно вперед; $r = z$). Аналогично получаем для радиальной составляющей плотности расходящегося потока

$$\mathrm{j}_{\mathrm{out}} = \frac{|f_{\mathrm{c}}|^2}{r^2}\,\frac{\hbar k}{\mu}\,. \qquad (5.23)$$

Подставляя (5.22) и (5.23) в (1.35), получаем, что дифференциальное сечение кулоновского рассеяния обычным образом связано с кулоновской амплитудой $f_{\mathrm{c}}(\theta)$:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}\Omega} = |f_{\mathrm{c}}(\theta)|^2\,. \qquad (5.24)$$

§ 5.2. Решение задачи о кулоновском рассеянии в параболических координатах

Наряду с представлением амплитуды кулоновского рассеяния в виде бесконечного ряда парциальных амплитуд (5.21) существует другой способ точного решения задачи, при котором амплитуда $f_{\mathrm{c}}(\theta)$ получается в виде очень простого и замкнутого алгебраического выражения.

Будем исходить из стационарного уравнения Шредингера непосредственно для волновой функции $\psi_{\mathrm{c}}(\mathbf{r})$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2 + \frac{\mathrm{Z}_1\mathrm{Z}_2 e^2}{r} - E\right]\psi_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}) = 0\,. \qquad (5.25)$$

Введя кулоновский параметр n (соотношение (5.4)), запишем это уравнение в виде

$$\boldsymbol{\nabla}^2\psi_{\mathrm{c}} + (k^2 - \frac{2\mathrm{n}k}{r})\psi_{\mathrm{c}} = 0\,. \qquad (5.26)$$

Направим ось z по импульсу падающих частиц $\mathbf{k}$ и сделаем подстановку

$$\psi_{\mathrm{c}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{ikz}F(\mathbf{r})\,. \qquad (5.27)$$

Уравнение для новой функции $F(\mathbf{r})$:

$$\nabla^2 F + 2ik\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{2nk}{r}F = 0\,. \qquad (5.28)$$

ищем в параболических координатах (ξ, η, φ), связанных со сферическими координатами соотношениями

$$\begin{cases} \xi = r - z\ , \\ \eta = r + z\ , \\ \varphi = \varphi\ ; \end{cases} \qquad \begin{cases} r = (\xi + \eta)/2\ , \\ z = (\eta - \xi)/2\ , \\ \varphi = \varphi\ . \end{cases} \qquad (5.29)$$

Оказывается, существует решение уравнения (5.28), зависящее лишь от одной переменной $\xi = r - z$:

$$F = F(r - z)\,. \qquad (5.30)$$

Соответствующее одномерное дифференциальное уравнение для функции $F(\xi)$ имеет вид

$$\xi\frac{d^2F}{d\xi^2} + (1 - ik\xi)\frac{dF}{d\xi} - nkF = 0\,. \qquad (5.31)$$

Его легко привести к виду уравнения (5.7) для вырожденной гипергеометрической функции $F(a, b, \xi)$. Отсюда с учетом (5.27) получаем

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \text{const} \cdot e^{ikz} F(-in, 1, ik\xi)\,. \qquad (5.32)$$

Зная асимптотический вид вырожденной гипергеометрической функции (соотношение (5.9)) и используя простые вспомогательные формулы

$$(-ik\xi)^{in} = (e^{-i\frac{\pi}{2}} \cdot e^{\ln k\xi})^{in} = e^{\frac{n\pi}{2} + in\ln k(r-z)}\ , \qquad (5.33)$$

$$r - z = 2r\sin^2(\theta/2)\ , \qquad (5.34)$$

находим асимптотику волновой функции на больших расстояниях от кулоновского центра:

$$\psi_c(\mathbf{r})\big|_{(r-z)\to\infty} = \text{const} \cdot \frac{e^{n\pi/2}}{\Gamma(1 + in)} \times$$

$$\times \left\{ \left[1 - \frac{\mathrm{n}^2}{2ikr \sin^2(\theta/2)} \right] \mathrm{e}^{ikz + i\mathrm{n}\ln k(r-z)} + \right.$$

$$\left. + f_{\mathrm{c}}(\theta) \frac{\mathrm{e}^{ikr - i\mathrm{n}\ln 2kr}}{r} \right\} , \quad (5.35)$$

где амплитуда рассеяния дается выражением

$$f_{\mathrm{c}}(\theta) = \frac{\Gamma(1+i\mathrm{n})}{i\Gamma(-i\mathrm{n})} \frac{\mathrm{e}^{-i\mathrm{n}\ln\left(\sin^2(\theta/2)\right)}}{2k \sin^2(\theta/2)} =$$

$$= \frac{\mathrm{n}}{2k \sin^2(\theta/2)} \mathrm{e}^{-i\mathrm{n}\ln\left(\sin^2(\theta/2)\right) + i\pi + 2i\sigma_0} . \quad (5.36)$$

Входящий сюда параметр σ_0 определяется по общей формуле (5.17) для кулоновских фаз:

$$\sigma_0 = \arg\Gamma(1+i\mathrm{n}) , \quad (5.37)$$

Формула (5.36) дает точное выражение для кулоновской амплитуды рассеяния. Отсюда мы снова получаем формулу Резерфорда для дифференциального сечения кулоновского рассеяния:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{R}} = |f_{\mathrm{c}}(\theta)|^2 = \frac{\mathrm{n}^2}{4k^2 \sin^4(\theta/2)} =$$

$$= \frac{\mu^2 \mathrm{Z}_1{}^2 \mathrm{Z}_2{}^2 e^4}{4\hbar^4 k^4 \sin^4(\theta/2)} . \quad (5.38)$$

(см. § 2.4). Мы видим, что точная кулоновская амплитуда рассеяния (5.36) отличается от борновской амплитуды (2.27) лишь фазовым множителем:

$$f_{\mathrm{c}}(\theta) = f_{\mathrm{c}}^{(\mathrm{B})}(\theta) \, \mathrm{e}^{-i\mathrm{n}\ln\left(\sin^2(\theta/2)\right) + i\pi + 2i\sigma_0} \quad (5.39)$$

При рассеянии частицы изолированным кулоновским центром этот фазовый множитель никак себя не проявляет. Однако в других условиях, когда взаимодействие с кулоновским центром составляет лишь часть эффекта и

кулоновская амплитуда рассеяния интерферирует с другими составляющими амплитуды рассеяния, различие между амплитудами $f_c(\theta)$ и $f_c^{(B)}(\theta)$ становится существенным.

§ 5.3. Рассеяние на потенциале с кулоновской асимптотикой

Задача о рассеянии заряженной частицы на потенциале с кулоновской асимптотикой занимает видное место и в атомной физике (таков потенциал, создаваемый частично ионизированным атомом), и в ядерной физике (такова суперпозиция короткодействующего потенциала сильного взаимодействия и дальнодействующего кулоновского взаимодействия). Пусть потенциал $V(r)$ совпадает с (1.30) всюду, кроме области малых r:

$$V(r) = Z_1 Z_2 e^2/r\ , \quad r > r_0\ . \tag{5.40}$$

Решая с таким потенциалом радиальное уравнение Шредингера (3.34), мы при $r > r_0$ имеем дело с известным нам уравнением (5.2). Его общее решение дается соотношением (5.12): это суперпозиция регулярной и нерегулярной кулоновских функций $F_\ell(r)$ и $G_\ell(r)$.

В § 5.1, рассматривая рассеяние на чисто кулоновском потенциале, мы отбросили слагаемое с $G_\ell(r)$, поскольку оно не отвечало, требуемому поведению волновой функции $u_\ell(r)$ в нуле. Сейчас ситуация другая — выражение (5.12) необходимо нам лишь для представления волновой функции $u_\ell(r)$ при $r > r_0$. Что же касается вида $u_\ell(r)$ при $r < r_0$, то он определяется конкретными свойствами потенциала $V(r)$ в этой области и находится (с учетом обычного условия в нуле: $u_\ell(r) \to r^{\ell+1}$) совершенно независимо от уравнения (5.2); далее остается лишь «сшить» полученные решения для функции $u_\ell(r)$ на границе области $r < r_0$ и $r > r_0$. Таким образом, задача решается в принципе совершенно аналогично тому, как в

§ 3.4 мы решали задачу о рассеянии частицы потенциалом конечного радиуса. Все отличие в том, что там во внешней области мы пользовались волновыми функциями свободной частицы, а здесь — в области $r > r_0$ — кулоновскими волновыми функциями (5.13) и (5.14).

Перепишем выражение (5.12), которому удовлетворяет решение нашей задачи при $r > r_0$, аналогично формуле (3.41), т.е. возьмем вместо констант C_ℓ и D_ℓ две другие константы интегрирования C_ℓ и δ_ℓ:

$$\mathrm{u}_\ell(r)|_{r>r_0} = \mathrm{C}_\ell\{\cos\delta_\ell\, F_\ell(r) - \sin\delta_\ell\, G_\ell(r)\}\ . \quad (5.41)$$

Согласно (5.15) и (5.16), при $r \to \infty$ отсюда получаем

$$\mathrm{u}_\ell(r)|_{r\to\infty} \sim \sin(kr - \ell\,\pi/2 - \mathrm{n}\ln(2kr) + \sigma_\ell + \delta_\ell)\ . \quad (5.42)$$

Таким образом, искажение кулоновского взаимодействия на малых расстояниях проявляется в том, что каждая парциальная волна $\mathrm{u}_\ell(r)$ приобретает на больших расстояниях от центра дополнительную фазу δ_ℓ. В ядерной физике, когда $V(r)$ — это суперпозиция потенциалов, сильного, и кулоновского взаимодействий:

$$V(r) = V_\mathrm{s}(r) + V_\mathrm{c}(r)\,, \quad (5.43)$$

эту дополнительную (по отношению к σ_ℓ) фазу называют **фазой ядерного рассеяния**. Не следует путать: строго говоря, фаза ядерного рассеяния δ_ℓ в случае взаимодействия рассеянной частицы с потенциалом (5.43) не есть то же самое, что фаза δ_ℓ в случае рассеяния нейтральной частицы той же массы на соответствующем потенциале $V_\mathrm{s}(r)$, получаемом из (5.43) за вычетом чисто кулоновского взаимодействия $V_\mathrm{c}(r)$. Другими словами, фаза кулоновского и фаза ядерного рассеяния, вообще говоря, не аддитивны.

Используя асимптотическое выражение для радиальных волновых функций (5.42) для построения полной волновой функции задачи рассеяния $\psi_\mathrm{c}(r)$ при $r \to \infty$

(подобно тому, как это делалось при переходе от (5.18) к (5.20) и (5.21)), мы находим амплитуду рассеяния заряженной частицы на потенциале с кулоновской асимптотикой:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell}(2\ell+1)\left(e^{2i\sigma_\ell+2i\delta_\ell} - 1\right)P_\ell(\cos\theta)\ .$$

Этому выражению удобно придать иной вид, выделив в виде отдельного слагаемого точную амплитуду кулоновского рассеяния $f_c(\theta)$:

$$f(\theta) = f_c(\theta) + \Delta f(\theta) =$$

$$= f_c(\theta) + \frac{1}{2ik}\sum_{\ell}(2\ell+1)\ \times$$

$$\times\, e^{2i\sigma_\ell}(e^{2i\delta_\ell} - 1)P_\ell(\cos\theta)\ . \quad (5.44)$$

Хотя в настоящем изложении мы построили $f_c(\theta)$ методом разложения по парциальным волнам, конечно, в практических расчетах следует пользоваться для $f_c(\theta)$ гораздо более компактным выражением (5.36). Что касается второго слагаемого в (5.44), то в ядерных задачах его принято называть **амплитудой ядерного рассеяния**, **модифицированного кулоновским взаимодействием**:

$$\tilde{f}_N(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell}(2\ell+1)\,e^{2i\sigma_\ell}(e^{2i\delta_\ell} - 1)P_\ell(\cos\theta)\,. \quad (5.45)$$

Подчеркнем, что эта модификация заключается не только в том, что в $\tilde{f}_N(\theta)$, в отличие от выражения (3.25), входят дополнительно кулоновские фазы σ_ℓ, но и в том, что сами фазы ядерного рассеяния δ_ℓ тоже несут на себе след кулоновского взаимодействия.

Выражение (5.44) удобно для параметризации рассеяния заряженной частицы потенциалом типа (5.43)

при невысоких энергиях, когда во втором слагаемом можно ограничиться вкладом небольшого числа парциальных волн с малыми ℓ.

Упражнения

5.1. Найти приближенное выражение для кулоновской фазы σ_0 при малых n. Сравнить с тем, что дает формула борновского приближения (3.56).

5.2. Показать, что в эйкональном приближении полная фаза рассеяния частицы потенциалом (5.43) есть сумма фаз рассеяния чисто ядерным и чисто кулоновским потенциалами.

5.3. Показать, что в эйкональном приближении фаза рассеяния частицы кулоновским потенциалом дается выражением

$$\chi_c(b) = (2Z_1Z_2e^2/\hbar v)\ln(kb)\ . \qquad (5.46)$$

Лекция 6. Дополнительные вопросы теории потенциального рассеяния

§ 6.1. Функция Грина частицы, движущейся в поле силового центра

В § 1.1—1.2 мы ввели функцию Грина (гриновский оператор) свободного движения частицы:

$$\hat{G}_0^{(\pm)}(E) = \lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E \pm i\varepsilon - \hat{H}_0} \equiv \frac{1}{E^{(\pm)} - \hat{H}_0}\ . \qquad (6.1)$$

где $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2$ — оператор кинетической энергии частицы. Введем по аналогии с (6.1) функцию Грина, описывающую движение частицы в заданном потенциальном поле $V(\mathbf{r})$:

$$\hat{G}^{(\pm)}(E) = \frac{1}{E^{(\pm)} - \hat{H}}\ , \qquad (6.2)$$

где $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r})$. Из эрмитовости гамильтониана $\hat{H}$ следует соотношение

$$\hat{G}^{(+)}(E) = \left[\hat{G}^{(-)}(E)\right]^{+} . \qquad (6.3)$$

Выясним связь между операторами (6.1) и (6.2). Для этого воспользуемся операторным тождеством

$$\frac{1}{\hat{A}} - \frac{1}{\hat{B}} = \frac{1}{\hat{B}}\left(\hat{B} - \hat{A}\right)\frac{1}{\hat{A}} = \frac{1}{\hat{A}}\left(\hat{B} - \hat{A}\right)\frac{1}{\hat{B}} . \qquad (6.4)$$

Полагая $\hat{A} = (E^{(\pm)} - \hat{H})$, а $\hat{B} = (E^{(\pm)} - \hat{H}_0)$, получаем

$$\hat{G}^{(\pm)}(E) = \hat{G}_0^{(\pm)}(E) + \hat{G}_0^{(\pm)}(E)\hat{V}\hat{G}^{(\pm)}(E) . \qquad (6.5)$$

Это соотношение можно рассматривать как операторное уравнение для функции Грина $G^{(\pm)}(E)$. В координатном представлении оно имеет вид

$$\left\langle \mathbf{r}'\middle|\hat{G}^{(\pm)}(E)\middle|\mathbf{r}\right\rangle = \left\langle \mathbf{r}'\middle|\hat{G}_0{}^{(\pm)}(E)\middle|\mathbf{r}\right\rangle + $$

$$+ \int \left\langle \mathbf{r}'\middle|\hat{G}_0{}^{(\pm)}(E)\middle|\mathbf{r}''\right\rangle V(\mathbf{r}'')\left\langle \mathbf{r}''\middle|\hat{G}^{(\pm)}(E)\middle|\mathbf{r}\right\rangle \mathrm{d}^3\mathrm{r}'' . \qquad (6.6)$$

где матричные элементы:

$$\left\langle \mathbf{r}'\middle|\hat{G}_0{}^{(\pm)}(E)\middle|\mathbf{r}\right\rangle \equiv G_0{}^{(\pm)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') .$$

даются формулами (1.21), (1.22).

Запишем соотношение (6.5) более компактно:

$$\hat{G}^{(\pm)}(E) = \hat{G}_0^{(\pm)}(E)[1 + \hat{V}\hat{G}^{(\pm)}(E)] . \qquad (6.7)$$

Заметим, что оно справедливо для операторов (6.1) и (6.2), определенных для любого комплексного параметра Z:

$$\hat{G}_0(Z) = \frac{1}{Z - \hat{H}_0} , \quad \hat{G}(Z) = \frac{1}{Z - \hat{H}} . \qquad (6.8)$$

Наряду с (6.5) легко получить и обратное соотношение. При произвольном Z они имеют вид

$$\hat{G}(\mathrm{Z}) = \hat{G}_0(\mathrm{Z})\left[1 + \hat{V}\hat{G}(\mathrm{Z})\right] , \qquad (6.9)$$

$$\hat{G}_0(\mathrm{Z}) = \hat{G}(\mathrm{Z})\left[1 - \hat{V}\hat{G}_0(\mathrm{Z})\right] . \qquad (6.10)$$

С помощью функции Грина $G^{(\pm)}(\mathrm{Z})$ иногда оказывается удобным переформулировать основное уравнение стационарной теории потенциального рассеяния — уравнение Липпмана—Швингера (1.32). Запишем его сначала в компактной форме:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \varphi_{\mathbf{k}} + \hat{G}_0^{(\pm)}(E)\hat{V}\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} , \qquad (6.11)$$

где первый член в правой части - это по-прежнему плоская волна:

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} . \qquad (6.12)$$

Подставим (6.10) в (6.11):

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \varphi_{\mathbf{k}} + \hat{G}^{(\pm)}(E)\left[1 - \hat{V}\hat{G}_0{}^{(\pm)}\right]\hat{V}\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} . \qquad (6.13)$$

Комбинация $\left[1 - \hat{V}\hat{G}_0{}^{(\pm)}(E)\right]\hat{V}\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$, как видно из (6.11), есть $\hat{V}\varphi_{\mathrm{k}}$. Таким образом, можно исключить из правой части формулы (6.13) функцию $\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \varphi_{\mathbf{k}} + \hat{G}^{(\pm)}(E)\hat{V}\varphi_{\mathbf{k}} . \qquad (6.14)$$

В координатном представлении это же соотношение имеет вид

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \int G^{(\pm)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathrm{V}(\mathbf{r}')\mathrm{e}^{i\mathbf{kr}'}\mathrm{d}^3r'. \qquad (6.15)$$

В различных задачах многоканальной теории столкновений необходимо знать асимптотику функции Грина частицы, движущейся в заданном потенциальном поле. Рассмотрим этот вопрос.

Запишем в координатном представлении соотношение (6.7):

$$G^{(\pm)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \qquad (6.16)$$

$$= \int G_0{}^{(\pm)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}'')\left[\delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') + V(\mathbf{r}'')G^{(\pm)}(E, \mathbf{r}'', \mathbf{r}')\right]\mathrm{d}^3 r''.$$

и поставим сюда асимптотическое выражение функции Грина свободной частицы (1.23). Тогда получаем

$$G^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{r\to\infty} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ik\mathrm{r}}}{r} \times$$

$$\times\left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} + \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}''}V(\mathbf{r}'')\ G^{(+)}(\mathrm{E}, \mathbf{r}'', \mathbf{r}')\ \mathrm{d}^3\mathrm{r}''\right\} =$$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ik\mathrm{r}}}{r}\times \qquad (6.17)$$

$$\times\left\{\mathrm{e}^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} + \int \mathrm{e}^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}''}V(\mathbf{r}'')G^{(-)}(E, \mathbf{r}'', \mathbf{r}')\mathrm{d}^3 r''\right\}^*,$$

где звездочка означает комплексное сопряжение.

Воспользуемся теперь соотношением (6.3). В координатном представлении оно имеет вид

$$\left\langle \mathbf{r}\middle|\hat{G}^{(+)}(E)\middle|\mathbf{r}'\right\rangle = \left\langle \mathbf{r}'\middle|\hat{G}^{(-)}(E)\middle|\mathbf{r}\right\rangle^*, \qquad (6.18)$$

т.е.

$$G^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \ [G^{(-)}(E, \mathbf{r}', \mathbf{r})]^* \ . \qquad (6.19)$$

Подставляя (6.19) в (6.17), получаем

$$G^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{r\to\infty} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ik\mathrm{r}}}{r} \times$$

$$\times \quad \left\{\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} + \int G^{(-)}(E, \mathbf{r}', \mathbf{r}'')V(\mathbf{r}'')\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}''}\ \mathrm{d}^3 r''\right\}^*.$$

В фигурных скобках мы узнаём правую часть выражения (6.15). Таким образом, окончательно асимптотическое выражение функции Грина для частицы, движущейся в заданном потенциале, принимает вид

$$G^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')|_{r\to\infty} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\ [\psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}(\mathbf{r}')]^* \ . \quad (6.20)$$

Напомним, что модуль вектора $\mathbf{k}'$ определяется энергией частицы E, а направлен он по вектору $\mathbf{r}$:

$$k' = \sqrt{2\mu E}/\hbar \ , \mathbf{k}' = k'\,\mathbf{r}/\mathrm{r} \quad (6.21)$$

§ 6.2. Оператор перехода ($\hat{t}$ −оператор)

Во многих задачах теории столкновений (особенно при рассмотрении многочастичных систем) очень удобным оказывается использование так называемого $\hat{t}$ −оператора (**оператора перехода**). Определим его сначала для случая потенциального рассеяния и рассмотрим на этом примере его свойства.

В качестве такого определения можно взять одно из следующих соотношений:

$$\hat{t}(Z) = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}(Z)\hat{V} \ , \quad (6.22)$$

$$\hat{t}(Z) = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(Z)\hat{t}(Z) \ , \quad (6.23)$$

которые легко перевести друг в друга, если воспользоваться соотношениями (6.9), (6.10), связывающими между собой гриновские операторы $\hat{G}_0(\mathrm{Z})$ и $\hat{G}(\mathrm{Z})$.

Подействуем оператором (6.23) на волновую функцию свободного движения (6.12):

$$\hat{t}(Z)\varphi_{\mathbf{k}} = \hat{V}\varphi_{\mathbf{k}} + \hat{V}\hat{G}_0(Z)\hat{t}(Z)\varphi_{\mathbf{k}} \ . \quad (6.24)$$

Одновременно подействуем на левую и правую части уравнения Липпмана — Швингера (6.11) оператором $\hat{V}$:

$$\hat{V}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)} = \hat{V}\varphi_{\mathbf{k}} + \hat{V}\hat{G}_0{}^{(+)}(E)\hat{V}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \ . \quad (6.25)$$

Сравнивая (6.25) с (6.24), находим соотношение

$$\lim_{\varepsilon\to+0}\hat{t}(E_k + i\varepsilon)\varphi_{\mathbf{k}} = \hat{V}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \ . \quad (6.26)$$

Обратимся к общему выражению амплитуды потенциального рассеяния (1.34):

$$f(\mathbf{k}\,,\mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\,V(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\mathrm{d}^3r \quad . \qquad (6.27)$$

Входящие в интеграл функции $\varphi_{\mathbf{k}'} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ относятся к разным гамильтонианам: первая – к гамильтониану свободного движения $\widehat{H}_0$, а вторая – к гамильтониану частицы в потенциальном поле $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}$. Поэтому общее выражение (6.27) нельзя рассматривать как матричный элемент какого-либо оператора между состояниями одного и того же набора. Если, однако, подставить в (6.27) соотношение (6.26), то мы как раз получаем такую возможность:

$$f(\mathbf{k}\,,\mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\lim_{\varepsilon\to+0}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\,\hat{t}(E_k + i\varepsilon)\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\mathrm{d}^3r \quad . \qquad (6.28)$$

Отсюда виден смысл термина оператор перехода: матричный элемент $\hat{t}$ –оператора есть амплитуда перехода из состояния свободного движения с импульсом $\mathbf{k}$ в состояние свободного движения с импульсом $\mathbf{k}'$.

Для нахождения $\hat{t}$ –оператора удобно пользоваться импульсным представлением. В связи с этим уточним еще раз наши обозначения. Закрепим дираковские обозначения $|\mathbf{k}\rangle$ за векторами состояний свободного движения, образующими полный ортонормированный набор:

$$\sum_k |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = 1 \;, \qquad \langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \;. \qquad (6.29)$$

Такой выбор означает, что в x –представлении волновая функция свободного движения, есть

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\,\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \;. \qquad (6.30)$$

где $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}$ по-прежнему соответствует формулам (1.6) и (6.12). Таким образом, в дираковских обозначениях амплитуда рассеяния (6.28) есть следующий матричный элемент:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\lim_{\varepsilon\to+0}\langle\mathbf{k}'|\hat{t}(E+i\varepsilon)|\mathbf{k}\rangle \quad . \qquad (6.31)$$

где E - энергия частицы, величина которой однозначно определена импульсами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$:

$$E = E_k = E_{k'} \quad , \qquad (6.32)$$

в нерелятивистском случае

$$E_k = \hbar^2 k^2/2\mu \quad . \qquad (6.33)$$

Совокупность матричных элементов $\hat{t}$ −оператора в обкладках состояний свободного движения частицы $\langle\mathbf{k}'|\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle$ называется t **−матрицей.** Будем говорить, что мы рассматриваем $\hat{t}$ −оператор $\hat{t}(Z)$ **на массовой поверхности** (или, как более принято в нерелятивистской теории, **- на энергетической поверхности**) если параметр $Z = E$ в матричных элементах $\langle\mathbf{k}'|\hat{t}(E)|\mathbf{k}\rangle$ связан с импульсами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ соотношением (6.32).

Необходимость рассмотрения t −оператора вне массовой поверхности видна сразу же, как только мы приступим к решению уравнений для этого оператора. Запишем, например, уравнение (6.23) в импульсном представлении:

$$\langle\mathbf{k}'|\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle = \langle\mathbf{k}'|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle + \langle\mathbf{k}'|\hat{V}\,\frac{1}{Z-\hat{H}_0}\,\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle. \quad (6.34)$$

Гриновский оператор $\hat{G}_0(\mathrm{Z})$ в этом представлении диагонален:

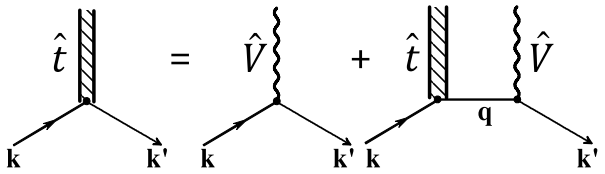
$$\langle\mathbf{q}'|\frac{1}{Z-\hat{H}_0}|\mathbf{q}\rangle = \frac{1}{Z-q^2/2\mu}\delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \, . \qquad (6.35)$$

Поэтому для (6.34) имеем

$$\langle \mathbf{k}'|\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle = \langle \mathbf{k}'|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle + \int \frac{\langle \mathbf{k}'|\hat{V}|\mathbf{q}\rangle\langle \mathbf{q}|\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle}{Z - q^2/2\mu}\,\mathrm{d}^3q \ . \quad (6.36)$$

Входящий под интеграл элемент t −матрицы $\langle \mathbf{q}|\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle$ представляет $\hat{t}$ −оператор вне массовой поверхности, так как импульс $\mathbf{q}$ и параметр Z не связаны между собой никаким соотношением, даже если матричный элемент в левой части равенства соответствует условию (6.32).

Уравнение (6.36) для $\hat{t}$ −оператора эквивалентно уравнению (1.32) для ψ-функции. Будем также называть его уравнением Липпмана — Швингера. Часто бывает удобно изобразить его графически:



, (6.37)

где тонкая волнистая линия изображает однократное взаимодействие частицы с силовым центром, а широкая линия — суммарный эффект взаимодействий всех кратностей; $\mathbf{q}$ — импульс свободно движущейся частицы в промежуточном состоянии.

§ 6.3. Решение уравнения Липпмана — Швингера для t −оператора. Случай сепарабельного взаимодействия

Общих методов решения уравнения (6.36), (6.37), которые были бы пригодны для любого взаимодействия $\hat{V}$, не существует. Если взаимодействие $\hat{V}$ мало, можно воспользоваться методом итераций. Видно, в частности, что графическое уравнение (6.37) превращается в этом случае в ряд диаграмм (2.3). В низшем порядке теории возмущений t −матрица совпадает с матрицей потенциала взаимодействия $\hat{V}$:

$$\langle \mathbf{k}'|\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle^{(\mathrm{B})} = \langle \mathbf{k}'|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle \ , \qquad (6.38)$$

и, следовательно, не зависит от Z

Другой случай, когда уравнение Липпмана-Швингера имеет простое (и точное!) решение — это случай сепарабельного взаимодействия $\hat{V}$.

Пусть в матрице $\langle \mathbf{k}'|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle$ переменные $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ разделяются:

$$\langle \mathbf{k}'|\hat{V}|\mathbf{k}\rangle = -\lambda \mathrm{g}(\mathbf{k})\mathrm{g}(\mathbf{k}') \, , \qquad (6.39)$$

здесь λ - вещественная константа, характеризующая силу взаимодействия. Потенциалы типа (6.39) эффективно используются в ядерной физике. Таков, например, один из широко известных сепарабельных потенциалов — **потенциал Ямагучи**, где формфактор $\mathrm{g}(\mathbf{k})$ выбирается в виде

$$\mathrm{g}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2 + \beta^2} \qquad (6.40)$$

Подставим (6.39) в уравнение Липпмана — Швингера (6.36) и будем искать t −матрицу в виде

$$\langle \mathbf{k}'|\hat{t}(Z)|\mathbf{k}\rangle = \Lambda(Z)\mathrm{g}(\mathbf{k})\mathrm{g}(\mathbf{k}') \ . \qquad (6.41)$$

Тогда для искомой функции $\Lambda(Z)$ получаем алгебраическое уравнение

$$\Lambda(Z) = -\lambda - \lambda\,\Lambda(Z) \int \mathrm{d}^3 q \, \frac{|\mathrm{g}(\mathbf{q})|^2}{Z - q^2/2\mu} \ . \qquad (6.42)$$

с простым решением:

$$\Lambda(Z) = -\frac{\lambda}{1 + \lambda \int \mathrm{d}^3 q \, \frac{|\mathrm{g}(\mathbf{q})|^2}{Z - q^2/2\mu}} \ . \qquad (6.43)$$

Чтобы найти амплитуду рассеяния частицы на потенциале (6.39), функцию $\Lambda(Z)$ надо вычислить в точке $Z = E^{(+)}$ с

соответствующим обходом полюса при интегрировании по q. В отличие от борновской амплитуды, которая при $\theta = 0$ вещественна и потому не удовлетворяет оптической теореме, амплитуда (6.41) при $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, вообще говоря, комплексна. Используя оптическую теорему, можно найти полное сечение рассеяния частицы на потенциале (6.39).

§ 6.4. Об аналитических свойствах t −матрицы

Воспользуемся полученным выше точным решением задачи потенциального рассеяния и рассмотрим на его примере вопрос об аналитических свойствах t −матрицы.

Согласно соотношению (6.43), функция $\Lambda(Z)$, а следовательно, и t −матрица $\langle \mathbf{k}' | \hat{t}(Z) | \mathbf{k} \rangle$ имеют полюс в точке $Z = Z_0$, где обращается в нуль знаменатель всего выражения (6.43); значение Z_0 удовлетворяет алгебраическому уравнению

$$1 + \lambda \int \mathrm{d}^3 q \, \frac{|\mathrm{g}(\mathbf{q})|^2}{Z_0 - q^2/(2\mu)} = 0 \ . \qquad (6.44)$$

Дальше мы увидим, что при $\lambda < 0$ (потенциал отталкивания) это уравнение не имеет решений на вещественной оси Z; если же $\lambda > 0$ (потенциал притяжения), то такие решения могут быть при $Z_0 < 0$. Отрицательные значения энергии частицы соответствуют ее связанным состояниям. В связи с этим обратимся к задаче о связанных состояниях частицы в сепарабельном потенциале (6.39).

В p −представлении стационарное уравнение Шредингера для волновой функции связанного состояния $\varphi_0(\mathbf{k})$ имеет вид

$$\left(\frac{k^2}{2\mu} - E \right) \varphi_0(\mathbf{k}) + \int \langle \mathbf{k} | \hat{V} | \mathbf{q} \rangle \, \varphi_0(\mathbf{q}) \mathrm{d}^3 q = 0 \ . \qquad (6.45)$$

Подставляя сюда (6.39), находим $\varphi_0(\mathbf{k})$ с точностью до нормировочного множителя:

$$\varphi_0(\mathbf{k}) = \text{const} \cdot \frac{\mathrm{g}(\mathbf{k})}{E - k^2/(2\mu)} \quad . \qquad (6.46)$$

Чтобы найти собственные значения E, перепишем (6.46) в форме, непосредственно следующей из (6.45):

$$\varphi_0(\mathbf{k}) = -\lambda \left[\int \mathrm{g}(\mathbf{q})\, \varphi_0(\mathbf{q}) \mathrm{d}^3 q \right] \frac{\mathrm{g}(\mathbf{k})}{E - k^2/(2\mu)} \quad , \quad (6.47)$$

затем умножим правую и левую части на $\mathrm{g}(\mathbf{k})$ и проинтегрируем по $\mathrm{d}^3 k$. Отсюда получаем

$$1 = -\lambda \int \mathrm{d}^3 k \, \frac{|\mathrm{g}(\mathbf{k})|^2}{E - k^2/(2\mu)} \quad . \qquad (6.48)$$

Это есть не что иное, как уравнение (6.44) для нахождения полюсов t −матрицы. Таким образом, вещественные полюса t −матрицы $\langle \mathbf{k}' | \hat{t}(Z) | \mathbf{k} \rangle$ лежат на отрицательной полуоси и совпадают с энергиями связанных состояний частицы. Это свойство t −матрицы, установленное нами на примере движения частицы в сепарабельной потенциале, является в действительности общим свойством t −матрицы любых простых и сложных систем.

§ 6.5. Эйкональное приближение для функции Грина свободной частицы

Здесь мы рассмотрим, еще один дополнительный вопрос теории потенциального рассеяния, который не связан с материалом предыдущих параграфов данной лекции, но имеет значение для дальнейшего. Обратимся к уравнению (4.23):

$$i \frac{k\hbar^2}{\mu} \frac{\partial \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z)}{\partial z} = V(\mathbf{b}, z) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z) \ , \qquad (6.49)$$

которое вместе с дополнительным условием

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z \to -\infty) = 1 \qquad (6.50)$$

дает решение задачи потенциального рассеяния в эйкональном приближении:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z) = \mathrm{e}^{ikz}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z) =$$

$$= \exp\left[ikz - i\frac{\mu}{\hbar^2 k}\int\limits_{-\infty}^{z} V(\mathbf{b}, z')\mathrm{d}z'\right] \qquad (6.51)$$

(здесь, как и в § 4.2, ось z выбрана вдоль импульса падающих частиц $\mathbf{k}$). Заметим, что дифференциальное уравнение первого порядка (6.49) вместе с дополнительным условием (6.50) эквивалентно следующему интегральному уравнению:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z) = 1 - i\frac{\mu}{\hbar^2 k}\int\limits_{-\infty}^{z} V(\mathbf{b}, z')\,\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z')\mathrm{d}z' \ . \qquad (6.52)$$

Перепишем это уравнение для самой волновой функции:

$$\varphi_k(\mathbf{b}, z) =$$

$$= \mathrm{e}^{ikz} - i\frac{\mu}{\hbar^2 k}\int\limits_{-\infty}^{z} \mathrm{e}^{ik(z-z')}V(\mathbf{b}, z')\,\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{b}, z')\mathrm{d}z' \ . \qquad (6.53)$$

Ему можно придать форму уравнения Липпмана — Швингера (1.13), если функцию Грина свободной частицы записать в виде

$$\hat{G}_0^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\frac{\mu}{\hbar^2 k}\mathrm{e}^{ik(z-z')}\,\delta(\mathbf{b} - \mathbf{b}')\,\theta(z - z') \ , \qquad (6.54)$$

где $\theta(x)$ —ступенчатая функция

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases} \qquad (6.55)$$

а $\mathbf{r} = \{\mathbf{b}, z\}$, $\mathbf{r}' = \{\mathbf{b}', \mathrm{z}'\}$ — цилиндрические координаты частицы.

Мы будем называть выражение (6.54) эйкональным приближением для функции Грина свободной частицы. Заметим, что уравнение (6.49), от которого мы отталкивались, справедливо лишь в области действия силового центра и не годится для рассмотрения асимптотических свойств волновой функции частицы. То же самое относится и к выражению (6.54); оно годится, лишь когда обе точки $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ лежат в области действия потенциала $V(\boldsymbol{r})$.

Упражнения

6.1. Для сепарабельного потенциала Ямагучи (6.40), заданного в p −представлении, найти потенциал $\langle \mathbf{r}' | \hat{V} | \mathbf{r} \rangle$ в x −представлении.

6.2. Найти длину рассеяния частицы на потенциале Ямагучи.

6.3. Вычислить полное сечение рассеяния частицы на потенциале Ямагучи (6.40).

6.4. t −Матрица (6.41), описывающая взаимодействие частицы с силовым центром, задана в виде

$$\langle \mathbf{k}' | \hat{t} | \mathbf{k} \rangle = b \cdot (\mathbf{k}\,\mathbf{k}') \quad , \qquad (6.56)$$

где b −некоторая константа. Найти угловое распределение рассеянных частиц. Показать, что в x −представлении t −матрица (6.56) имеет вид

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{t} | \mathbf{r} \rangle = (2\pi)^3 b \cdot [\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r})][\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r}')] \quad . \qquad (6.57)$$

6.5. Для потенциала Ямагучи записать волновую функцию связанного состояния $\varphi_0(\mathbf{k})$ в x −представлении. Выяснить поведение волновой функции $\varphi_0(\mathbf{r})$ при $r \to \infty$.

Лекция 7. Нестационарная теория столкновений

§ 7.1. Столкновения при одномерном движении

Изложенная в предыдущих лекциях формулировка квантовой задачи столкновений существенно опирается на интуитивные соображения и, как мы видели в § 1.3, содержит внутренние противоречия. Присущее стационарной теории представление о том, что плоская волна описывает бесконечный стационарный поток падающих частиц, не укладывается в рамки постулатов квантовой механики, согласно которым лишь квадратично-интегрируемые волновые функции могут описывать реальные состояния физических систем. То же относится и к искаженным волнам $\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r})$.

В данной лекции мы увидим, что методы расчета столкновений, разработанные в рамках стационарной теории, можно строго обосновать, если сформулировать задачу столкновений как нестационарную задачу. При таком подходе, рассматривая движение частиц как распространение волнового пакета, можно независимо получить общие формулы теории столкновений (1.41) и (1.34), из которых, как мы видели, следуют разнообразные частные — как точные, так и приближенные результаты.

Мы начнем с более простой задачи, чем та, что рассматривалась в лекции 1, — о столкновениях при одномерном движении.

Пусть поток частиц с массой μ и импульсом k движется вдоль оси x и встречает на своем пути прямоугольный барьер. Найдем вероятность прохождения частиц через барьер — коэффициент прохождения $T(k)$ или коэффициент отражения $R(k) = 1 - T(k)$. Часто эта задача благодаря математической легкости ее решения в рамках стационарной теории считается одной из простейших задач квантовой механики. Действительно, если описать падающие на барьер частицы плоской волной

$\varphi_0(x) = \mathrm{e}^{ikx}$, то решением стационарного уравнения Шредингера для рассматриваемой задачи будет волновая функция:

$$\varphi_k(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{ikx} + C_1\mathrm{e}^{-ikx}, & x < 0 \\ C_2\mathrm{e}^{\varkappa x} + C_3\mathrm{e}^{-\varkappa x}, & 0 \le x \le a \\ C_4\mathrm{e}^{ikx}, & x > a \end{cases} , \qquad (7.1)$$

где k и $\varkappa$ связаны с кинетической энергией падающих частиц E и высокой барьера V_0:

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \quad ; \qquad (7.2)$$

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}{\hbar} \quad ; \qquad (7.3)$$

(для определенности мы записали (7.1) применительно к случаю $E < V_0$). Коэффициент C_1 определяет интенсивность отраженной, а коэффициент C_4 — прошедшей волны:

$$R = |C_1|^2 \ ; \ T = |C_4|^2 \quad . \qquad (7.4)$$

Значения коэффициентов $C_1, \cdots, C_4$ найдем из условий сшивания волновой функции и ее производной в точках разрыва потенциала при $x = 0$ и $x = a$; они как раз дают необходимое число уравнений для нахождения этих коэффициентов. Опустим простые выкладки и приведем окончательный результат:

$$T = 1 - R = \frac{4k^2\varkappa^2}{(k^2 + \varkappa^2)\,\mathrm{sh}^2(\varkappa a) + 4k^2\varkappa^2} \quad . \qquad (7.5)$$

Хорошо видно сходство приведенного хода рассмотрения с тем, как мы решали в § 1.1 — 1.3 задачу потенциального рассеяния в трехмерном случае. Теперь пойдем другим путем и получим тот же результат (7.4), (7.5) с помощью нестационарной теории столкновений.

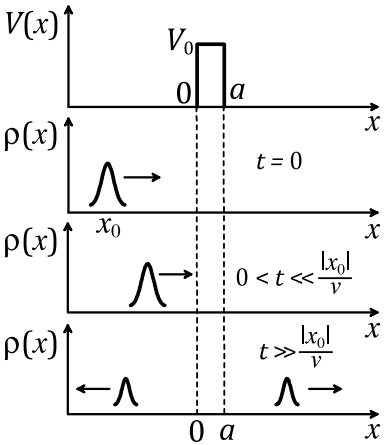


Рис. 7.1. Прямоугольный потенциальный барьер. Начальный волновой пакет. Распределение координаты частицы для различных моментов времени.

Зададим состояние нашей частицы в начальный момент времени $t = 0$ волновым пакетом:

$$\psi(x, t = 0) = \Phi(x) = \mathrm{e}^{ikx}\,\chi(x - x_0) \quad , \qquad (7.6)$$

где $\chi(\xi)$ — некоторая симметричная «колоколообразная» функция, имеющая максимум при $\xi = 0$. Легко проверить, что такой пакет описывает частицу, локализованную в окрестности точки $x = x_0$ и движущуюся со средней скоростью $v = \hbar k/\mu$. Пусть $x_0 < 0$, а $k > 0$. Тогда, согласно рис. 7.1, мы имеем пакет, движущийся слева в сторону барьера.

Сначала, пока основной массив пакета не достиг барьера (частица движется свободно) соответствующий интервал времени характеризуется величиной порядка $t_0 = |x_0|/v$. Известно, что при свободном движении пакет с течением времени расплывается тем быстрее, чем больше неопределенность его импульса (т.е. чем меньше неопределенность координаты) [1, § 16]. Так, в случае пакета гауссовой формы:

$$\chi(x-x_0)=\frac{1}{b^{1/2}\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2b^2}\right) \qquad (7.7)$$

начальная дисперсия координат $D_x(t=0)=b^2/2$ удваивается за время

$$\tau=\mu b^2/\hbar \quad . \qquad (7.8)$$

В дальнейшем будем предполагать, что дисперсия пространственного распределения частицы в состоянии (7.6) столь велика, что можно пренебречь расплыванием пакета за время движения t_0. В частном случае пакета гауссовой формы это означает:

$$b^2 \gg x_0/k \quad . \qquad (7.9)$$

То же неравенство полезно переписать для дисперсии импульса частицы:

$$D_p=(1/2)b^2 \ll k/(2x_0) \qquad (7.10)$$

(в отличие от дисперсии координаты она при свободном движении частицы не меняется). Далее нам будет удобно представить функцию $\chi(x-x_0)$ в виде интеграла Фурье:

$$\chi(x-x_0)=\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\varkappa\, A(\varkappa)\,\mathrm{e}^{i\varkappa(x-x_0)} \quad . \qquad (7.11)$$

Очевидно, что колоколообразной форме функции $\chi(\xi)$ соответствует сходная с ней колоколообразная форма функции $A(\varkappa)$. Будем считать, что начальные пространственные размеры пакета много меньше, чем расстояние x_0 от «центра тяжести» пакета до барьера при $t=0$. Вместе с (7.9) это условие соответствует тому, что ширина распределения $A(\varkappa)$ значительно меньше среднего импульса частицы k.

Задача о рассеянии частицы на потенциальном барьере сводится к решению нестационарного уравнения Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\widehat{H}\psi(x,t) \qquad (7.12)$$

с начальным условием (7.6). Как известно, общее решение уравнения (7.12) можно выразить через решения соответствующего стационарного уравнения

$$\widehat{H}\psi_k(x)=E_k\psi_k(x)\ . \qquad (7.13)$$

Покажем, что нужное нам решение, удовлетворяющее начальному условию (7.6), имеет вид

$$\psi_k(x,t)=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k'\,A(k'-k)\,\mathrm{e}^{-i(k'-k)x_0}\,\psi_{k'}(x)\mathrm{e}^{-iE_{k'}t/\hbar}\,, \qquad (7.14)$$

где $\psi_{k'}(x)$ — не что иное, как уже известное нам решение (7.1) стационарного уравнения Шредингера (7.13).

Выше мы предположили, что ширина распределения $A(k'-k)$ значительно меньше, чем k. Поэтому в подынтегральном выражении (7.14) можно заменить $E_{k'}$ приближенным значением:

$$E_{k'}=\frac{(\hbar k')^2}{2\mu}\approx\frac{(\hbar k)^2}{2\mu}+\frac{\hbar^2}{\mu}k(k'-k)=$$

$$=E_k+\hbar v_0(k'-k) \qquad (7.15)$$

и, следовательно, упростить выражение (7.14):

$$\psi_k(x,t)=\mathrm{e}^{-iE_kt/\hbar}\times$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k'A(k'-k)\mathrm{e}^{-i(k'-k)(x_0+v_0t)}\,\psi_{k'}(x)\ , \qquad (7.16)$$

Подставим сюда выражение (7.1) для функции $\psi_{k'}(x)$, имея в виду, что коэффициенты $C_1,\ C_2,\ C_3,\ C_4$ уже

найдены из условий сшивания. Тогда в областях - слева и справа от барьера получаем

$$\psi_k(x,t)|_{x<0} = \mathrm{e}^{ikx}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}\chi(x-(x_0+vt)) + \\ +C_1\mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}\chi(-x-(x_0+vt)); \qquad (7.17)$$

$$\psi_k(x,t)|_{x>a} = C_4\mathrm{e}^{ikx}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}\chi(x-(x_0+vt)) \quad .$$

В частности, при $t=0$

$$\psi_k(x,t=0)|_{x<0} = \mathrm{e}^{ikx}\chi(x-x_0) + C_1\mathrm{e}^{-ikx}\chi(-x-x_0) \ ,$$

$$\psi_k(x,t=0)|_{x>a} = C_4\mathrm{e}^{ikx}\chi(x-x_0) \ . \qquad (7.18)$$

Теперь вспомним, что, по условию, «ширина» распределения $\chi(\xi)$ много меньше, чем x_0. Значит, при $t=0$ в область $x<0$ попадает лишь «хвост» функции $\chi(-x-x_0)$, равно как в область $x>0$ — лишь «хвост» функции $\chi(x-x_0)$. Пренебрегая ими, видим, что с учетом специфических свойств, функции $\chi(\xi)$ выражение (7.18) эквивалентно условию (7.6) во всей области $-\infty < x < \infty$.

Итак, мы показали, что волновая функция $\psi_k(x,t)$, даваемая выражением (7.14), удовлетворяет и нестационарному уравнению Шредингера (7.12), и начальному условию (7.6), т.е. является искомым решением рассматриваемой задачи. Разберем физический смысл этого решения. Для этого удобно снова обратиться к выражению (7.17). В области $x<0$ при $t<|x_0|/v$ существен только первый член, описывающий движение частицы слева направо, а при $t>|x_0|/v$ — только второй член, описывающий движение частицы в обратном направлении. В области $x>a$ частица появляется с заметной вероятностью только при $t>|x_0|/v$ и в дальнейшем движется все время вправо, удаляясь от барьера. Все эти результаты проиллюстрированы на рис. 7.1, где изображено распределение координат частицы $\rho(x,t)=|\psi_k(x,t)|^2$ для различных

моментов времени; стрелки указывают направление движения частицы. Коэффициент прохождения частицы через барьер есть, очевидно, вероятность найти частицу в области $x > a$ при $t \gg t_0$:

$$T = W(x > a) = \int_a^\infty |\psi_k(x,t)|^2 \mathrm{d}x =$$

$$= |C_4|^2 \int_a^\infty |\chi(x - (x_0 + vt))|^2 \mathrm{d}x = |C_4|^2 \quad . \quad (7.19)$$

Аналогично вычисляется и коэффициент отражения:

$$R = W(x < a) = \int_{-\infty}^0 |\psi_k(x,t)|^2 \mathrm{d}x =$$

$$= |C_1|^2 \int_{-\infty}^0 |\chi(-x - (x_0 + vt))|^2 \mathrm{d}x = |C_1|^2 \quad . \quad (7.20)$$

Это, действительно, тот же результат (7.4), к которому мы пришли раньше, пользуясь стационарной теорией. Заметим, что функциям $\psi_k(x)$, к нахождению которых сводится вычисление коэффициентов прохождения и отражения, в нестационарной теории можно не придавать никакого физического смысла; во всяком случае, не будучи квадратично-интегрируемыми функциями, они не описывают никаких реальных состояний частицы.

Прежде чем перейти к трехмерному случаю, напомним, что мы специально так подобрали параметры начального состояния частицы, чтобы пренебречь расплыванием волнового пакета за время его движения к барьеру. Та же задача в условиях сильного расплывания пакета оказывается гораздо более сложной и требует специального рассмотрения.

§ 7.2. Рассеяние трехмерных волновых пакетов. Асимптотические состояния. Оператор рассеяния

Обратимся к той же задаче, которую мы с помощью стационарной теории столкновений рассматривали в § 1.1: постоянный однородный поток частиц, имеющих определенную заданную скорость, рассеивается неподвижным силовым центром. Необходимо, зная закон взаимодействия между частицей и силовым центром $V(\mathbf{r})$, вычислить дифференциальное сечение рассеяния. Вспомним, как решается эта задача в классической механике — с помощью уравнений движения мы прослеживаем траекторию движения каждой частицы и по ее асимптоте находим соотношение, связывающее прицельный параметр падающей частицы и угол рассеяния $\rho = \rho(\theta)$; затем с помощью этого соотношения вычисляем дифференциальное сечение:

$$d\sigma = 2\pi\rho d\rho = \frac{\rho(\theta)}{\sin\theta}\left|\frac{d\rho(\theta)}{d\theta}\right| d\Omega \quad . \qquad (7.21)$$

В квантовой механике нет строгого понятия траектории частицы. Частица никогда не локализована точно ни в пространстве, ни по импульсу, а ее движение, как мы видели, например, в предыдущем параграфе, — это эволюция соответствующего волнового пакета. Представим себе волновой пакет, который в начальный момент времени локализован достаточно далеко от силового центра и движется с некоторым средним импульсом $\mathbf{p}_0$ в его сторону. С течением времени пакет расплывается, потом, войдя основным своим массивом в область взаимодействия, как-то деформируется и затем расходится более или менее широким и, вообще говоря, неоднородным по направлениям «облаком». Вероятность попадания рассеянной частицы в детектор, расположенный где-то на большом расстоянии от силового центра, пропорциональна плотности вероятности найти частицу в

соответствующей точке. В общих чертах эта картина не отличается от картины движения одномерных пакетов. Однако проследить на формулах за ее развитием с течением времени, как это было сделано в § 7.1, в трехмерном случае технически очень сложно. Поэтому здесь приходится использовать особый математический аппарат и ряд новых физических понятий.

Пусть при $t = 0$ состояние частицы описывается некоторой квадратично-интегрируемой волновой функцией $\psi_0(\mathbf{r})$. Вид этой волновой функции вместе с гамильтонианом $\hat{H}$ полностью определяет всю непрерывную последовательность состояний $\psi(\mathbf{r}, t)$, через которые проходит пакет как во времена, предшествующие моменту $t = 0$, так и при $t > 0$. Иногда говорят, что функция $\psi_0(\mathbf{r})$ определяет всю квантовую «траекторию» (или квантовую «орбиту»), по которой движется частица (пакет).

Мы можем проследить за «траекторией» частицы с помощью оператора эволюции

$$\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \quad , \tag{7.22}$$

где $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ — полный гамильтониан системы,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(t)\psi_0(\mathbf{r}) \quad . \tag{7.23}$$

Оператор эволюции обладает свойством унитарности:

$$\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1 \quad , \tag{7.24}$$

поэтому нормировка функции (7.23) в процессе эволюции пакета не меняется.

При $t \to -\infty$, так же как и при $t \to +\infty$, основной массив волнового пакета находится вне области действия силового центра, т.е. мы имеем дело со свободным пакетом. Его эволюция определяется не гамильтонианом $\hat{H}$, а гамильтонианом свободной частицы $\hat{H}_0$. Введем соответствующий оператор эволюции:

$$\widehat{U}_0(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t} \quad . \tag{7.25}$$

При $t \to +\infty$ рассматриваемая нами «траектория» асимптотически приближается к «траектории» свободно движущейся частицы, которую можно описать волновой функцией вида

$$\psi(\mathbf{r},t)|_{t\to+\infty} = \widehat{U}_0(t)\psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) \quad . \tag{7.26}$$

Аналогично при $t \to -\infty$

$$\psi(\mathbf{r},t)|_{t\to-\infty} = \widehat{U}_0(t)\psi_{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) \quad . \tag{7.27}$$

Состояния $\psi_{\mathrm{in}}(\mathbf{r})$ и $\psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r})$ характеризующие асимптотические (при $t \to \pm\infty$) свойства «траектории» (7.23), называются **асимптотическими состояниями**, или **входной** (in) и **выходной** (out) **асимптотами** рассматриваемой «траектории».

Как и всю «траекторию» частицы, ее асимптоты $\psi_{\mathrm{in}}(\mathbf{r})$ и $\psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r})$ можно установить по виду волнового пакета $\psi_0(\mathbf{r})$ заданного в момент $t = 0$:

$$\psi_{\mathrm{in}}(\mathbf{r}) = \lim_{t\to-\infty} \widehat{U}_0^+(t)\widehat{U}(t)\psi_0(\mathbf{r}) \quad , \tag{7.28}$$

$$\psi_{\mathrm{out}}(\mathbf{r}) = \lim_{t\to+\infty} \widehat{U}_0^+(t)\widehat{U}(t)\psi_0(\mathbf{r}) \quad . \tag{7.29}$$

Введем два новых оператора $\widehat{\Omega}_\pm$ (их называют мёллеровскими операторами):

$$\widehat{\Omega}_\pm = \lim_{t\to\mp\infty} \widehat{U}_0^+(t)\widehat{U}(t) \quad . \tag{7.30}$$

Обратим внимание на то, что оператор $\widehat{\Omega}_+$ есть предел при $t \to -\infty$, а $\widehat{\Omega}_-$ — при $t \to +\infty$. Легко видеть, что эти операторы унитарны.

С помощью мёллеровских операторов можно связать между собой входную и выходную асимптоты квантовой «траектории», по которой движется частица.

Подставив (7.30) в (7.28), (7.29) и исключив из этих соотношений функцию $\psi_0(\mathbf{r})$, получаем:

$$\psi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \widehat{\Omega}_{-}^{+}\,\widehat{\Omega}_{+}\,\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) \quad . \tag{7.31}$$

Соотношение (7.31) можно записать более компактно, если определить **оператор рассеяния ($\widehat{S}$ –оператор)**:

$$\hat{S} = \widehat{\Omega}_{-}^{+}\,\widehat{\Omega}_{+} \quad , \tag{7.32}$$

$$\psi_{\text{out}} = \hat{S}\psi_{\text{in}} \quad . \tag{7.33}$$

Из унитарности мёллеровских операторов вытекает и **унитарность $\widehat{S}$ –оператора**:

$$\hat{S}^{+}\hat{S} = \hat{S}\,\hat{S}^{+} = 1 \quad . \tag{7.34}$$

$\hat{S}$ –оператор (и соответствующая ему S –матрица) относится к ряду важнейших понятий квантовой теории столкновений. Обычно детектор частиц, испытавших рассеяние, располагается на столь больших расстояниях от мишени, что их можно считать асимптотически далекими расстояниями, а времена, которые необходимы частице, чтобы дойти до детектора, — асимптотически большими временами. В таких условиях целью теории столкновений — как классической, так и квантовой — является нахождение по заданным параметрам входного состояния, свойств асимптотического состояния частицы при $t \to +\infty$; сама же пространственно-временная картина перехода частицы с in –асимптоты на out –асимптоту не представляет с изложенной точки зрения практического интереса. Такой программе как раз и отвечает введение в квантовую теорию столкновений $\hat{S}$ –оператора.

§ 7.3. Свойства $\widehat{S}$ –оператора. Связь $\widehat{S}$ –оператора с $\hat{t}$ –оператором

Чтобы выяснить свойства $\hat{S}$ –оператора, разберемся сначала в свойствах мёллеровских операторов $\widehat{\Omega}_{+}$ и $\widehat{\Omega}_{-}$.

Пусть $|\psi\rangle$ — некоторый вектор состояния частицы; в координатном представлении ему соответствует волновая функция $\langle r|\psi\rangle = \psi(r)$. Подействуем на него оператором (7.30):

$$\widehat{\Omega}_-|\psi\rangle = \lim_{t\to+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t} e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t}\,|\psi\rangle \ . \qquad (7.35)$$

Напомним, что символом $e^{\widehat{A}}$ в квантовой механике обозначается бесконечный ряд операторов

$$e^{\widehat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\widehat{A}^n \ ,$$

поэтому произведение экспонент в (7.35) нельзя заменить одной экспонентой с суммарным показателем $[i/\hbar]\,(\widehat{H} - \widehat{H}_0)t = [i/\hbar]\,\widehat{V}t$. Для перехода к пределу $t \to +\infty$ в (7.35) удобно воспользоваться следующим формальным приемом. Сначала вычислим производную

$$\frac{d}{dt}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t} e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t}\right) = \frac{i}{\hbar}\, e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}\, \widehat{V}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t} \ , \qquad (7.36)$$

а затем запишем произведение экспонент в (7.35) как интеграл от его производной. На верхнем пределе (при $t \to +\infty$) интеграл может расходиться, поэтому мы введем в подынтегральное выражение обрезающий множитель $e^{-\varepsilon t}$, где $\varepsilon > 0$; после вычисления интеграла устремим ε к нулю. В результате получаем

$$\widehat{\Omega}_-|\psi\rangle = |\psi\rangle + \frac{i}{\hbar}\lim_{\varepsilon\to+0}\int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t}\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\, \widehat{V}\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\, dt\,|\psi\rangle \ . \qquad (7.37)$$

Если теперь воспользоваться полным набором собственных векторов $|\mathbf{k}\rangle$ (точнее, обобщенных собственных векторов) оператора $\widehat{H}_0$, то легко получить матрицу оператора $\widehat{\Omega}_-$ в p −представлении. Мы определим векторы $|\mathbf{k}\rangle$ соотношениями:

$$\widehat{H}_0|\mathbf{k}\rangle = E_k|\mathbf{k}\rangle, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad , \tag{7.38}$$

нормировав их в соответствии с условием полноты

$$\int \mathrm{d}^3 k \, |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = 1 \quad . \tag{7.39}$$

При таком выборе волновая функция состояния $|k\rangle$ в координатном представлении имеет вид

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} \quad . \tag{7.40}$$

Как ив предыдущих лекциях, мы сохраним обозначение $\varphi_{\mathbf{k}}$ за плоской волной с единичной амплитудой: $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}$.

Подставляя (7.39) в (7.37) и используя затем (7.38), мы получаем

$$\widehat{\Omega}_-|\psi\rangle = |\psi\rangle +$$

$$+\frac{i}{\hbar}\lim_{\varepsilon\to+0}\int \mathrm{d}^3 k \int_0^\infty \mathrm{d}t \, \mathrm{e}^{-\varepsilon t} \, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t} \, \widehat{V} \, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\psi\rangle =$$

$$= |\psi\rangle + \lim_{\varepsilon\to+0}\int \mathrm{d}^3 \, k \, \frac{1}{E_k - i\varepsilon - \widehat{H}}\widehat{V}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\psi\rangle \quad . \tag{7.41}$$

Здесь мы узнаем гриновский оператор (6.2) частицы, движущейся в поле силового центра (см. § 6.1):

$$\widehat{G}^{(\pm)}(E) = \lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E \pm i\varepsilon - \widehat{H}} \quad ; \tag{7.42}$$

так в аппарат нестационарной теории столкновений начинают проникать специфические элементы аппарата стационарной теории. Используя (7.42), запишем (7.41) в виде

$$\widehat{\Omega}_- = 1 + \widehat{G}^{(-)}(E)\widehat{V} \quad . \tag{7.43}$$

Аналогичное соотношение (с заменой оператора $\hat{G}^{(-)}$ на $\hat{G}^{(+)}$) имеет место для мёллеровского оператора $\widehat{\Omega}_{+}$.

Формула (7.43) дает матрицу мёллеровского оператора в p −представлении:

$$\langle \mathbf{k}' | \widehat{\Omega}_{\pm} | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \langle \mathbf{k}' | \hat{G}^{(\pm)}(E_k) \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \ . \quad (7.44)$$

Полезна и другая запись

$$\langle \mathbf{r} | \widehat{\Omega}_{\pm} | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle + \langle \mathbf{r} | \hat{G}^{(\pm)}(E_k) \hat{V} | \mathbf{k} \rangle \quad , \quad (7.45)$$

что иначе означает

$$\widehat{\Omega}_{\pm} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + \int \langle \mathbf{r} | \hat{G}^{(\pm)}(E_k) | \mathbf{r}' \rangle V(\mathbf{r}') \, \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}'} \mathrm{d}^3 r' \ . \quad (7.46)$$

Здесь в правой части мы видим не что иное, как «искаженные волны» $\psi_{\mathbf{k}}{}^{(\pm)}(\mathbf{r})$ являющиеся решением стационарного уравнения Шредингера с соответствующими асимптотическими условиями (см. (1.8) и упр. 1.1). Таким образом, мёллеровский оператор превращает плоскую волну частицы в искаженную волну:

$$\widehat{\Omega}_{\pm} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} = \psi_{\mathbf{k}}{}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \quad . \quad (7.47)$$

(см. также (6.14)).

Теперь легко найти и матрицу $\hat{S}$ −оператора (S −матрицу) в p −представлении:

$$\langle \mathbf{k}' | \hat{S} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \langle \varphi_{\mathbf{k}'} | \hat{S} | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \langle \widehat{\Omega}_{-} \varphi_{\mathbf{k}'} | \widehat{\Omega}_{+} \varphi_{\mathbf{k}} \rangle =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \langle \psi_{\mathbf{k}'}{}^{(-)} | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} \rangle \quad . \quad (7.48)$$

Далее с помощью (6.14) выразим функцию $\psi_{\mathbf{k}}{}^{(-)}$ через функцию $\psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)}$:

$$\psi_{\mathbf{k}}{}^{(-)} = \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} + \{\hat{G}^{(-)}(E_k) - \hat{G}^{(+)}(E_k)\} \hat{V} \varphi_{\mathbf{k}} \quad (7.49)$$

и воспользуемся свойством ортогональности функций

$\psi_{\mathbf{k}}{}^{(\pm)}$ (см. упр. 7.3):

$$\langle \psi_{\mathbf{k}'}{}^{(+)} | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} \rangle = \langle \psi_{\mathbf{k}'}{}^{(-)} | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(-)} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \,, \quad (7.50)$$

а также соотношением

$$\{\hat{G}^{(+)}(E_{k'}) - \hat{G}^{(-)}(E_{k'})\} | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} \rangle = \lim_{\varepsilon \to +0} \left\{ \frac{1}{E_{k'} + i\varepsilon - \hat{H}} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{E_{k'} - i\varepsilon - \hat{H}} \right\} | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} \rangle = \lim_{\varepsilon \to +0} \left\{ \frac{1}{E_{k'} - E_k + i\varepsilon} - \right. \quad (7.51)$$

$$\left. - \frac{1}{E_{k'} - E_k - i\varepsilon} \right\} | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} \rangle = -2\pi i \delta(E_k - E_{k'}) | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} \rangle \ ,$$

которое следует из того, что $\psi_{\mathrm{k}}{}^{(+)}$ удовлетворяет уравнению $\hat{H} \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} = E_k \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)}$. Отсюда получаем

$$\langle \mathbf{k}' | \hat{S} | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \frac{2\pi i}{(2\pi)^3} \delta(E_k - E_{k'}) \langle V \varphi_{\mathbf{k}'} | \psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)} \rangle =$$

$$= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') -$$

$$- \frac{2\pi i}{(2\pi)^3} \delta(E_k - E_{k'}) \lim_{\varepsilon \to +0} \langle \varphi_{\mathbf{k}'} | t(E_k + i\varepsilon) | \varphi_{\mathbf{k}} \rangle \ ; \quad (7.52)$$

здесь мы воспользовались соотношением (6.26).

Итак, S –матрица, которую мы ввели рамках нестационарной теории столкновений, связана соотношением (7.52) с t –матрицей на массовой поверхности, введённой нами ранее в рамках стационарной теории. Перепишем это соотношение так, чтобы в обе его части входили векторы одного и того же базиса:

$$\langle \mathbf{k}' | \hat{S} | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') -$$

$$- 2\pi i \, \delta(E_k - E_{k'}) \lim_{\varepsilon \to +0} \langle \mathbf{k}' | t(E_k + i\varepsilon) | \mathbf{k} \rangle \ . \quad (7.53)$$

Входящий в правую часть этого равенства элемент t −матрицы пропорционален амплитуде рассеяния частицы на потенциале $\hat{V}$ (см. (6.32)):

$$\lim_{\varepsilon\to+0}\langle\mathbf{k}'|t(E_k+i\varepsilon)|\mathbf{k}\rangle|_{E_k=E_{k'}=E}=-\frac{\hbar^2}{4\pi^2\mu}f(\mathbf{k}\to\mathbf{k}')\,. \quad (7.54)$$

Используя это соотношение, мы можем связать S −матрицу с амплитудой рассеяния частицы:

$$\langle\mathbf{k}'|\hat{S}|\mathbf{k}\rangle=\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')+\frac{i\hbar^2}{2\pi\mu}\delta(E_k-E_{k'})f(\mathbf{k}\to\mathbf{k}')\,. \quad (7.55)$$

§ 7.4. Дифференциальное сечение потенциального рассеяния в нестационарной теории

Сформулируем задачу о вычислении дифференциального сечения рассеяния в квантовой механике как можно ближе к тому, как она формулируется в классической механике. Будем считать, что нам известны начальные (входные) параметры квантовой «траектории» частицы — средний прицельный параметр ρ_0 и средний импульс $\mathbf{p}_0$. Выберем, как обычно, ось z вдоль среднего импульса $\mathbf{p}_0$.

Рассмотрим несколько конкретных примеров начального состояния частицы. Пакет

$$\psi_{\text{in}}{}^{(\text{A})}(\mathbf{r})\sim e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{b}\right)^2}e^{ip_0z}=e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\rho}{b}\right)^2}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{b}\right)^2}e^{ip_0z} \quad (7.56)$$

локализован в окрестности точки $\mathbf{r}=0$ и размазан равномерно по всем направлениям; в p −представлении он описывается функцией

$$\langle\mathbf{p}|\psi_{\text{in}}{}^{(\text{A})}\rangle\sim e^{-\frac{1}{2}(b\mathbf{p}_\perp)^2}e^{-\frac{1}{2}b^2(p_z-p_0)^2}\,, \quad (7.57)$$

где p_z — продольная; $\mathbf{p}_\perp$ — поперечная составляющая импульса частицы. Пакет

$$\psi_{\text{in}}{}^{(\text{B})}(\mathbf{r})\sim e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\rho-\rho_0}{b}\right)^2}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z}{b}\right)^2}e^{ip_0z} \quad (7.58)$$

такой же, как в случае А, но его «центр тяжести» смещен на вектор $\boldsymbol{\rho}_0$ перпендикулярно оси z; в p −представлении он описывается функцией

$$\langle \mathbf{p}|\psi_{\text{in}}{}^{(\text{B})}\rangle \sim \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(b\mathbf{p}_\perp)^2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}b^2(p_z-p_0)^2}\mathrm{e}^{-i\mathbf{p}_\perp\boldsymbol{\rho}_0} \quad . \qquad (7.59)$$

Заметим, что, вообще, если $\Phi_0(p)$ — пакет с «центром тяжести» на оси z, то

$$\langle \mathbf{p}|\psi_{\text{in}}\rangle = \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}_\perp\boldsymbol{\rho}_0}\Phi_0(\mathbf{p}) \qquad (7.60)$$

это такой же пакет, но его «центр тяжести» смещен на вектор $\boldsymbol{\rho}_0$ перпендикулярно оси z.

Пусть, так или иначе, задано начальное состояние частицы ψ_{in}. Вероятность того, что идеальный детектор зарегистрирует импульс частицы в конечном состоянии в интервале d^3p, есть очевидно,

$$\mathrm{d}\omega(\mathbf{p}) = |\langle \mathbf{p}|\psi(t\to+\infty)\rangle|^2\mathrm{d}^3p \quad , \qquad (7.61)$$

где волновая функция $\psi(t)$ описывает, согласно (7.23), эволюцию пакета. Используя (7.26), а также учитывая, что вектор $|\mathbf{p}\rangle$ — это собственный вектор оператора эволюции $\widehat{U}_0(t)$, запишем (7.61) в другом виде:

$$\mathrm{d}\omega(\mathbf{p}) = |\langle \mathbf{p}|\psi_{\text{out}}\rangle|^2\mathrm{d}^3p \quad . \qquad (7.62)$$

Ранее мы определили S −матрицу соотношением (7.33), а также установили связь между S −матрицей и амплитудой рассеяния частицы (соотношение (7.55)). Используя эти соотношения, выразим амплитуду импульсного распределения в выходном состоянии ψ_{out} через амплитуду импульсного распределения во входном состоянии ψ_{in}:

$$\langle \mathbf{p}|\psi_{\text{out}}\rangle = \langle \mathbf{p}|\hat{S}|\psi_{\text{in}}\rangle = \langle \mathbf{p}|\psi_{\text{in}}\rangle +$$

$$+\frac{i\hbar^2}{2\pi\mu}\int \mathrm{d}^3p'\delta\big(E_p - E_{p'}\big)f(\mathbf{p}'\to\mathbf{p})\,\langle \mathbf{p}'|\psi_{\text{in}}\rangle \quad . \qquad (7.63)$$

Примеры распределений $\langle \mathbf{p}|\psi_{\text{in}}\rangle$ были приведены в

формулах (7.57) и (7.59).

Теперь мы примем одно очень важное допущение, связанное с тем, что в реальных экспериментах детектор упруго рассеянных частиц всегда стоит несколько в стороне от направления потока падающих частиц. Будем считать поэтому, что детектор не чувствует первого слагаемого в (7.63), которое быстро затухает по мере отклонения вектора $\mathbf{p}$ от оси z:

$$\langle \mathbf{p}|\psi_{\text{out}}\rangle \to \frac{i\hbar^2}{2\pi\mu}\int \mathrm{d}^3p'\delta\big(E_p - E_{p'}\big)f(\mathbf{p}\to\mathbf{p}')\,\langle \mathbf{p}'|\psi_{\text{in}}\rangle\,. \quad (7.64)$$

Тогда для вероятности рассеяния частицы с заданным средним значением прицельного параметра имеем

$$\mathrm{d}\omega(\mathbf{p})|_{\rho_0} = \frac{\mathrm{d}^3p}{4\pi^2\mu^2}\iint \mathrm{d}^3p'\mathrm{d}^3p''\delta\big(E_p - E_{p'}\big)\delta\big(E_p - E_{p''}\big)\times$$

$$\times f(\mathbf{p}'\to\mathbf{p})f^*(\mathbf{p}''\to\mathbf{p})\mathrm{e}^{-i(\mathbf{p}'_\perp-\mathbf{p}''_\perp)\boldsymbol{\rho}_0}\Phi_0(\mathbf{p}')\Phi_0^*(\mathbf{p}'')\,. \quad (7.65)$$

Полное число частиц, попадающих в единицу времени в детектор с импульсом в интервале d^3p есть интеграл по всем значениям ρ_0 в плоскости, перпендикулярной оси z, помноженный да плотность потока падающих частиц j_{in}. Отнеся это число к единичному потоку падающих частиц, мы получаем дифференциальное сечение рассеяния:

$$\mathrm{d}\sigma = \int \mathrm{d}\omega(\mathbf{p})|_{\rho_0}\mathrm{d}^2\rho_0 = \frac{\mathrm{d}^3p}{4\pi^2\mu^2}\int \mathrm{d}^2\rho_0\iint \mathrm{d}^3p'\mathrm{d}^3p''\times$$

$$\times\,\delta\big(E_p - E_{p'}\big)\delta\big(E_p - E_{p''}\big)f(\mathbf{p}'\to\mathbf{p})f^*(\mathbf{p}''\to\mathbf{p})\times$$

$$\times\,\mathrm{e}^{-i(\mathbf{p}'_\perp-\mathbf{p}''_\perp)\boldsymbol{\rho}_0}\Phi_0(\mathbf{p}')\Phi_0^*(\mathbf{p}'')\ . \quad (7.66)$$

Интегрирование по прицельному параметру ρ_0 дает δ-функцию поперечных импульсов, которую мы преобразуем далее вместе с δ-функцией от энергий:

$$\delta^{(2)}(\mathbf{p}'_\perp - \mathbf{p}''_\perp)\delta\big(E_{p'} - E_{p''}\big) =$$

$$= \frac{\mu}{p_z'}\delta^{(2)}(\mathbf{p}_\perp' - \mathbf{p}_\perp'')\delta(p_z' - p_z'') = \frac{\mu}{p_z'}\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'') \ . \quad (7.67)$$

После интегрирования по d^3p'' получаем

$\mathrm{d}\sigma =$

$$= \frac{\mathrm{d}^3p}{\mu^2}\int \mathrm{d}^3p' \frac{\mu}{p_z'}\delta\big(E_p - E_{p'}\big)|f(\mathbf{p}' \to \mathbf{p})|^2|\Phi_0(\mathbf{p}')|^2 \ . \quad (7.68)$$

Теперь осталось преобразовать элемент d^3p*:*

$$\mathrm{d}^3p = p^2\mathrm{d}p\mathrm{d}\Omega = \mu p\mathrm{d}E_p\mathrm{d}\Omega \quad , \qquad (7.69)$$

и проинтегрировать по $\mathrm{d}E_p$. В итоге получаем

$$\mathrm{d}\sigma = \mathrm{d}\Omega\int \mathrm{d}^3p' \frac{p'}{p_z'}|f(\mathbf{p}' \to \mathbf{p})|^2|\Phi_0(\mathbf{p}')|^2\Big|_{E_p = E_{p'}} \ . \qquad (7.70)$$

Это и есть окончательный результат вычисления дифференциального сечения рассеяния $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$, если не делать никаких специальных допущений о форме начального волнового пакета $\Phi_0(\mathbf{p}')$. Предположим, теперь, что разброс импульса частицы $\mathbf{p}'$ вокруг его среднего значения $\mathbf{p}_0$ в начальном состоянии столь мал, что: а) отношение p'/p'_z под интегралом в (7.70) можно заменить единицей; б) амплитуда $f(\mathbf{p}' \to \mathbf{p})$ изменяется в пределах этого разброса пренебрежимо мало, так что ее можно заменить амплитудой $f(\mathbf{p_0} \to \mathbf{p})$ и, следовательно, вынести из-под интеграла. Поскольку функция $\Phi_0(\mathbf{p}')$ нормирована, как обычно, на единицу:

$$\int \mathrm{d}^3p'|\Phi_0(\mathbf{p}')|^2 = 1 \quad , \qquad (7.71)$$

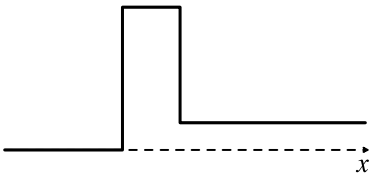
то после сделанных выше предположений формула (7.70) для дифференциального сечения рассеяния переходит в известную формулу стационарной теории столкновений:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\mathbf{p}_0 \to \mathbf{p})|^2 \quad . \qquad (7.72)$$

Итак, используя последовательную нестационарную формулировку задачи потенциального рассеяния, мы обосновали метод вычисления дифференциального сечения рассеяния, построенный первоначально с использованием ряда интуитивных соображений в рамках стационарной теории (лекция 1). Одновременно мы показали, что применимость этого метода (в том числе основной формулы (7.72), где амплитуда рассеяния $f(\mathbf{p}_0 \to \mathbf{p})$ находится из асимптотики искаженной волны $\psi_{\mathbf{p}_0}^{(+)}(\mathbf{r})$ определяется рядом физических условий. Их суть сводится к следующему: 1) состояние частицы в падающем пучке представляет собой четко локализованный в импульсном пространстве волновой пакет; 2) детектор расположен вне конуса, в котором сосредоточены частицы падающего пучка, и регистрирует только частицы, испытавшие рассеяние.

Упражнения

7.1. Рассчитать коэффициент прохождения частицы через несимметричный барьер, изображенный на рисунке. Сравнить значение коэффициента прохождения в случаях, когда падающий поток идет на барьер слева и справа.



7.2. Получить приближенное выражение для коэффициента прохождения частицы сквозь прямоугольный барьер (рис. 7.1), если кинетическая энергия частицы много меньше высоты барьера.

7.3. Используя свойство ортогональности плоских волн и соотношение (7.47), доказать свойство ортогональности искаженных волн (7.50).

7.4. Выяснить условия вынесения амплитуды рассеяния из-под интеграла (7.70), если частица рассеивается на потенциале Юкавы (1.27), а начальный волновой пакет описывается формулой (7.58).

7.5. Пусть $|E\ell m\rangle -$ полный набор состояний свободного движения частицы:

$$\langle E'\ell'm'|E\ell m\rangle = \delta(E-E')\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \quad . \qquad (7.73)$$

Используя соотношения (7.55), (3.18) и (3.22), а также, известную формулу преобразования

$$\langle \mathbf{k}|E\ell m\rangle = \langle k|E\rangle\langle \hat{\mathbf{n}}_{\mathbf{k}}|\ell m\rangle = \langle k|E\rangle \mathrm{Y}_{\ell m}(\hat{\mathbf{n}}_{\mathbf{k}}) \quad , \qquad (7.74)$$

показать, что $S-$матрица в представлении $\{E\ell m\}$ диагональна:

$$\langle E'\ell'm'|S|E\ell m\rangle = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\delta(E-E')S_\ell \quad , \qquad (7.75)$$

а ее элементы S_ℓ выражаются через фазы рассеяния частицы:

$$S_\ell = \mathrm{e}^{2i\delta_\ell} \quad . \qquad (7.76)$$

7.6. Используя результат предыдущего упражнения, а также результаты, полученные в § 3.2, показать, что $S-$матрица определяет соотношение между сходящейся к центру и расходящейся от центра волнами в асимптотике волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)}(\mathbf{r})$:

$$\psi_{\mathbf{k}}{}^{(+)}(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \qquad (7.77)$$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i^\ell(2\ell+1)}{2ik}\left\{\frac{\mathrm{e}^{-i(kr-\ell\pi/2)}}{r} - S_\ell\frac{\mathrm{e}^{i(kr-\ell\pi/2)}}{r}\right\}\mathrm{P}_\ell(\cos\theta)\,.$$

Раздел II

МНОГОЧАСТИЧНАЯ ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ

Лекция 8. Упругое и неупругое рассеяния частиц на составной системе в борновском приближении

§ 8.1. Борновское приближение как первый порядок теории возмущений. Дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяний

Переходя от задачи потенциального рассеяния к описанию столкновений частицы с составной системой, мы встречаемся с рядом принципиально новых понятий теории столкновений, таких, как многоканальный характер взаимодействия, обменное рассеяние, эффекты ухода с массовой поверхности. Начиная с простейшего приближенного подхода — теории возмущений, введем самые необходимые термины и обозначения.

Если, например, электрон сталкивается с атомом или нейтрон с атомным ядром, то будем называть электрон (нейтрон) частицей x, атом (ядро) — мишенью A, а совокупность частицы и мишени — системой (физической системой). Будем пользоваться стандартным обозначением процессов упругого и неупругого рассеяний:

$$x + A \to x + A$$

$$x + A \to x' + A^* \quad . \tag{8.1}$$

Вплоть до лекции 16 будем пренебрегать эффектами тождественности частиц и всеми спиновыми эффектами. Будем также считать мишень A бесконечно тяжелой по сравнению с налетающей частицей, т.е. пренебрежем различием между лабораторной системой отсчета и системой центра масс рассматриваемой физической системы.

Пусть ξ — набор внутренних переменных мишени, $\mathbf{r}$ — пространственная координата частицы x; $\widehat{\mathcal{H}}_A$ —

гамильтониан свободной мишени, его собственные значения ε_n и собственные функции $\Phi_n(\xi) \equiv |n\rangle$ соответствуют стационарным состояниям мишени:

$$\hat{\mathcal{H}}_A \Phi_n(\xi) = \varepsilon_n \Phi_n(\xi); \quad n = 0, 1, 2, \ldots \quad . \qquad (8.2)$$

Мы выбрали обозначения таким образом, что $\Phi_0(\xi)$ — это волновая функция основного состояния мишени; положим также $\varepsilon_n = 0$, т.е. будем отсчитывать энергию возбуждения мишени ε_n от энергии основного состояния. Функции Φ_n ортогональны друг другу и вместе с волновыми функциями непрерывного спектра мишени образуют полный набор:

$$\langle \Phi_n | \Phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad , \qquad (8.3)$$

$$\sum \Phi_n(\xi) \Phi_n^*(\xi') = \delta(\xi - \xi') \quad ; \qquad (8.4)$$

здесь символ $\sum$ обозначает суммирование по дискретному спектру и интеграл по непрерывному спектру мишени.

Пусть $\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$ — оператор кинетической энергии частицы, а $\hat{V} = \hat{V}(\xi, \mathbf{r})$ — оператор ее взаимодействия с мишенью. Тогда полный гамильтониан системы можно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{\mathcal{H}}_A + \hat{K} + \hat{V} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad , \qquad (8.5)$$

где

$$\hat{H}_0 = \hat{\mathcal{H}}_A + \hat{K} \qquad (8.6)$$

— гамильтониан системы, состоящей из невзаимодействующих друг с другом частицы и мишени, $\hat{V}$ — оператор возмущения этой системы.

Вычислим в низшем порядке теории возмущений дифференциальное сечение рассеяния частицы $d\sigma_n/d\Omega$, соответствующее переходу мишени из основного состояния $|0\rangle$ в некоторое состояние дискретного спектра $|n\rangle$. Для этого воспользуемся известной формулой (см., напр.

[2]) для плотности скорости перехода системы в состояние непрерывного спектра под действием постоянного возмущения:

$$\frac{\mathrm{d}\Lambda}{\mathrm{d}\gamma} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\Psi_f^{(0)}\left|\hat{V}\right|\Psi_i^{(0)}\rangle\right|^2 \rho(E_f,\gamma)\Big|_{E_f=E_i} \quad . \qquad (8.7)$$

В общем случае γ — совокупность квантовых чисел, которые вместе с энергией E_f полностью характеризуют конечное состояние невозмущенной системы $\Psi_f^{(0)}$: $\{f\} = \{E_f, \gamma\}$. В нашем случае

$$\Psi_i^{(0)} = \Psi_{0,\mathbf{k}_i}^{(0)}(\mathbf{r},\xi) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}\Phi_0(\xi) \quad , \qquad (8.8)$$

$$\Psi_f^{(0)} = \Psi_{\mathrm{n},\mathbf{k}_f}^{(0)}(\mathbf{r},\xi) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}\Phi_\mathrm{n}(\xi) \quad . \qquad (8.9)$$

где $\mathbf{k}_i$ и $\mathbf{k}_f$ — импульсы (волновые векторы) падающей и рассеянной частиц $\mathbf{k}_i = \mathbf{p}_i/\hbar$, $\mathbf{k}_f = \mathbf{p}_f/\hbar$. Энергия конечного состояния E_f определяется квантовым числом n и абсолютной величиной импульса рассеянной частицы:

$$E_f = \frac{p_f^2}{2\mu} + \varepsilon_\mathrm{n} \quad . \qquad (8.10)$$

В силу закона сохранения энергии ($E_f = E_i$)

$$\frac{p_f^2}{2\mu} + \varepsilon_\mathrm{n} = \frac{p_i^2}{2\mu} \quad . \qquad (8.11)$$

Роль дополнительного квантового числа γ в формуле (8.7) играет направление вылета рассеянной частицы; будем характеризовать его единичным вектором $\hat{\mathbf{k}}_f = \mathbf{k}_f/|\mathbf{k}_f|$. Таким образом, в качестве $\mathrm{d}\gamma$ в (8.7) подставляем элемент телесного угла $\mathrm{d}\Omega = \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi$, где θ и φ — полярный и азимутальный углы рассеяния. Итак, плотность скорости перехода $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$ в интересующем нас случае дается выражением

$$\frac{\mathrm{d}\Lambda}{\mathrm{d}\gamma} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle \mathbf{k}_f, \mathrm{n}\middle|\hat{V}\middle|\mathbf{k}_i, 0\right\rangle\right|^2 \rho\left(\mathrm{n}, \mathbf{k}_f\right) \quad . \tag{8.12}$$

Легко видеть, что плотность конечных состояний $\rho(\mathrm{n}, \mathbf{k}_f)$ зависит лишь от одной величины $\mathbf{k}_f$. Ее явный вид зависит от того, как мы выберем нормировку волновой функции конечного состояния $\Psi^{(0)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}, \xi)$; важно, чтобы при этом выполнялось условие полноты:

$$\sum \int \Psi^{(0)}_{0,\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}, \xi)\Psi^{(0)*}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}', \xi')\, \rho\left(\mathrm{n}, \mathbf{k}_f\right)\mathrm{d}E_f\,\mathrm{d}\Omega = \\ = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(\xi - \xi') \quad . \tag{8.13}$$

При выбранной нами нормировке (8.9) $\rho(\mathrm{n}, \mathbf{k}_f)$ имеет вид

$$\rho\left(\mathrm{n}, \mathbf{k}_f\right) \to \rho\left(k_f\right) = \frac{\mu p_f}{(2\pi\hbar)^3} \quad . \tag{8.14}$$

Если же функции $\Psi^{(0)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}, \xi)$ нормировать по-другому, например

$$\widetilde{\Psi}^{(0)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}, \xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}\Phi_{\mathrm{n}}(\xi) \tag{8.15}$$

или

$$\widetilde{\widetilde{\Psi}}^{(0)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}, \xi) = \frac{\sqrt{\mu p_f}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}\Phi_{\mathrm{n}}(\xi) \quad , \tag{8.16}$$

то соответственно надо изменить и вид плотности конечных состояний:

$$\tilde{\rho}\left(k_f\right) = \mu p_f \quad , \tag{8.17}$$

$$\tilde{\tilde{\rho}}\left(k_f\right) = 1 \quad . \tag{8.18}$$

Подчеркнем: выбор нормировочного множителя в функции конечного состояния $\Psi^{(0)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}, \xi)$ не имеет

никакого значения для получения правильного окончательного результата, если одновременно с этим — в соответствии с условием (8.13) — устанавливается и явный вид плотности конечных состояний $\rho(\mathrm{n}, \mathbf{k}_f)$.

Итак, подставив (8.14) в (8.12), мы получим вероятность, перехода в единицу времени из основного состояния мишени $|0\rangle$ в дискретное состояние $|\mathrm{n}\rangle$, отнесенную к единичному телесному углу вылета рассеянной частицы. Чтобы получить из этой величины, искомое дифференциальное сечение рассеяния $\mathrm{d}\sigma_\mathrm{n}/\mathrm{d}\,\Omega$ надо поделить ее на плотность потока падающих частиц:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{\mathrm{j_{in}}}\frac{\mathrm{d}\Lambda}{\mathrm{d}\Omega} \quad . \tag{8.19}$$

Величину $\mathrm{j_{in}}$ найдем по общей формуле плотности тока вероятности (1.36), подставив в нее волновую функцию начального состояния $\Psi^{(0)}_{0,\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}, \xi)$. При выбранной нами нормировке этой функции (8.8)

$$\mathbf{j}_\mathrm{in} = \hbar\mathbf{k}_i/\mu = \mathbf{p}_i/\mu = \mathbf{v}_i \quad , \tag{8.20}$$

где $\mathbf{v}_i$ — вектор скорости падающих частиц. В итоге получаем

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{p_f}{p_i}\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\langle \mathbf{k}_f, \mathrm{n}|\hat{V}|\mathbf{k}_i, 0\rangle\right|^2 \quad ; \tag{8.21}$$

при $|\mathrm{n}\rangle = |0\rangle$ формула (8.21) дает дифференциальное сечение упругого, а при $|\mathrm{n}\rangle \neq |0\rangle$ — неупругого рассеяния.

Выражение (8.21) удобно переписать в несколько ином виде:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{p_f}{p_i}\left|F^{(\mathrm{B})}_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i)\right|^2 \quad , \tag{8.22}$$

где величину

$$F^{(\mathrm{B})}_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle \mathbf{k}_f, \mathrm{n}|\hat{V}|\mathbf{k}_i, 0\rangle =$$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \Phi_{\mathrm{n}}^{*}(\xi)\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}\,V(\xi,\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}}\Phi_0(\xi)\mathrm{d}^3r\mathrm{d}\xi \quad (8.23)$$

назовем борновской амплитудой рассеяния частицы на составной системе. В частном случае, когда мишень не имеет внутренних степеней свободы (т.е. $\hat{V}(\xi,\mathbf{r})\to V(\mathbf{r})$, $p_f\to p_i$), формулы (8.23) и (8.22) переходят в формулы (2.4) и (1.34) теории потенциального рассеяния.

§ 8.2. Упругое рассеяние быстрых электронов на атомах

Применим полученные результаты к рассеянию электронов на атомах. При этом будем стремиться к тому, чтобы представить их в форме, не зависящей от конкретного вида атомных волновых функций. Как и в предыдущем параграфе, опустим все, что касается обменного рассеяния (тождественности частиц) и взаимодействий, зависящих от спинов.

Оператор возмущения $\hat{V}$ есть в нашем случае оператор взаимодействия налетающего электрона с ядром атома и всеми Z электронами атома:

$$\hat{V}=\hat{V}(\mathbf{r};\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_Z)=-\frac{\mathrm{Z}e^2}{r}+\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}}\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|}\ , \quad (8.24)$$

а борновская амплитуда рассеяния выражается через интеграл по координате рассеиваемого электрона $\mathbf{r}$ и координатам атомных электронов $\{\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_Z\}$:

$$F_{\mathrm{n}0}^{(\mathrm{B})}(\mathbf{k}_f,\mathbf{k}_i)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{d}^3r\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\int \Phi_{\mathrm{n}}^{*}(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_Z)\times$$

$$\times\left\{-\frac{\mathrm{Z}e^2}{r}+\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}}\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|}\right\}\Phi_0(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_Z)\mathrm{d}^3r_1\dots\mathrm{d}^3r_Z\ . \quad (8.25)$$

Первое слагаемое в (8.25), обусловленное взаимодействием налетающего электрона с ядром атома, отлично от нуля только в случае упругого рассеяния; при этом интегрирование по переменной $\mathbf{r}$ дает борновскую амплитуду рассеяния электрона на точечном заряде $\mathrm{Z}e$ (см. (2.27)).

Отложим до следующего параграфа исследование формулы (8.25) в случае неупругого рассеяния и займемся борновской амплитудой упругого рассеяния:

$$F_{00}^{(\mathrm{B})}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \equiv F_{\mathrm{elas}}^{(\mathrm{B})}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = \\ = -\frac{2\mu e^2}{\hbar^2}\frac{\mathrm{Z}}{q^2}\left\{-1 + \frac{1}{\mathrm{Z}}\langle 0|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}|0\rangle\right\}. \qquad (8.26)$$

При получении (8.26) из (8.25) мы воспользовались вспомогательным соотношением

$$\int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|}\mathrm{d}^3 r = \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}\int \frac{\mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_j|}\mathrm{d}^3 r = \frac{4\pi}{q^2}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} \qquad (8.27)$$

и ввели обозначение матричного элемента по атомным волновым функциям:

$$\langle \mathrm{n}|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}|0\rangle \equiv \\ \equiv \int \Phi_{\mathrm{n}}^*(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_Z)\left[\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}\right]\Phi_0(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_Z)\mathrm{d}^3 r_1 \ldots \mathrm{d}^3 r_Z \ . (8.28)$$

Легко видеть, что входящий в (8.26) диагональный матричный элемент (8.28) — это фурье-образ плотности электронов в основном состоянии атома $\rho_e(\mathbf{r})$:

$$\langle 0|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}\,|0\rangle = \int \rho_e(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\,\mathrm{d}^3r \quad , \tag{8.29}$$

$$\rho_e(\mathbf{r}) = \langle 0|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \delta\big(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\big)\,|0\rangle \quad . \tag{8.30}$$

Определим формфактор плотности электронов соотношением

$$\mathcal{F}_e(\mathbf{q}) = \frac{1}{\mathrm{Z}}\int \rho_e(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\,\mathrm{d}^3r \tag{8.31}$$

и выразим через него борновскую амплитуду упругого рассеяния электронов:

$$F_{\mathrm{elas}}^{(\mathrm{B})}\big(\mathbf{k}_f,\mathbf{k}_i\big) = \frac{2\mu e^2}{\hbar^2}\frac{\mathrm{Z}}{q^2}\{-1+\mathcal{F}_e(\mathbf{q})\} \quad . \tag{8.32}$$

Тогда дифференциальное сечение упругого рассеяния вычислится по формуле

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{elas}}}{\mathrm{d}\Omega} = \mathrm{Z}^2\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{R}}|-1+\mathcal{F}_e(\mathbf{q})|^2 \ , \tag{8.33}$$

где $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\,\Omega)_{\mathrm{R}}$ — дифференциальное сечение рассеяния электронов на точечном единичном заряде (формула Резерфорда (2.28)).

В обычных условиях распределение электронной плотности в основном состоянии атома сферически-симметрично:

$$\rho_e(\mathbf{r}) \to \rho_e(r) \quad , \tag{8.34}$$

тогда и формфактор (8.31) зависит лишь от модуля передаваемого импульса:

$$\mathcal{F}_e(\mathbf{q}) \to \mathcal{F}_e(q) \quad . \tag{8.35}$$

Следовательно, в таком случае (а также в случае аксиально-симметричного относительно импульса $\mathbf{k}_i$

распределения плотности $\rho_e(\mathbf{r})$) рассеяние электронов не зависит от азимутального угла φ.

Согласно определению (8.31), формфактор $\mathcal{F}_e(q)$ нормирован условием $\mathcal{F}_e(0) = 1$, а при малых q выражается через среднеквадратичный радиус электронной оболочки атома:

$$\mathcal{F}_e(q)|_{q\to 0} = 1 - \frac{1}{6}q^2\langle r^2\rangle + \cdots \quad . \qquad (8.36)$$

Подставляя (8.36) в (8.32), видим, что, хотя атом — это в среднем нейтральная система, вероятность рассеяния электрона на атоме отлична от нуля даже при бесконечно малых углах рассеяния:

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{elas}}}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\theta\to 0} = \frac{\mu^2 e^4 \mathrm{Z}^2}{9\hbar^4}(\langle r^2\rangle)^2 \quad ; \qquad (8.37)$$

в этом проявляется дальнодействующий характер кулоновского взаимодействия. Не следует, однако, воспринимать (8.37) как надежный в количественном отношении результат: борновская амплитуда (8.32) вещественна, и ее значение в нуле не удовлетворяет оптической теореме.

§ 8.3 Возбуждение дискретных уровней атомов быстрыми электронами. Понятие неупругого формфактора. Правила отбора при малом передаваемом импульсе. Энергетическая зависимость вероятности оптически разрешенных переходов

Вернемся к общему выражению (8.25) для борновской амплитуды рассеяния электрона на атоме. Если $|\mathrm{n}\rangle \neq |0\rangle$, то первое слагаемое в (8.25), обусловленное взаимодействием налетающего электрона с ядром атома, пропадает. Амплитуда неупругого рассеяния электрона, при котором атом совершает переход из состояния $|0\rangle$ в состояние $|\mathrm{n}\rangle$, а также, соответствующее парциальное

дифференциальное сечение рассеяния выражаются через **неупругий электронный формфактор** атома $\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q})$:

$$F_{\mathrm{n0}}^{(\mathrm{B})}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = -\frac{2\mu e^2}{\hbar^2}\frac{1}{q^2}\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q}) \quad ; \qquad (8.38)$$

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{p_f}{p_i}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{R}} |\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q})|^2 \quad . \qquad (8.39)$$

Мы определили неупругий формфактор соотношением

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q}) = \langle \mathrm{n}| \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} |0\rangle, \qquad |\mathrm{n}\rangle \neq |0\rangle \ . \qquad (8.40)$$

В различных задачах атомной физики он используется как модельно независимая структурная характеристика, отражающая все свойства волновых функций состояний $|0\rangle$ и $|\mathrm{n}\rangle$, которые в первом порядке теории возмущений проявляются в переходе $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$.

Рассмотрим процесс неупругого рассеяния, когда передаваемый импульс мал:

$$q \ll 1/a \quad , \qquad (8.41)$$

где a — некоторый параметр, характеризующий средние размеры атома. Разлагая входящую в $\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q})$ экспоненту в ряд Тейлора и учитывая ортогональность атомных волновых функций $|0\rangle$ и $|\mathrm{n}\rangle$, получаем, что при малых q неупругий формфактор $\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q})$ выражается через матричный элемент оператора электрического дипольного момента атома:

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q})|_{q\to 0} = \frac{i}{e}\mathbf{q}\langle \mathrm{n}|\widehat{\mathbf{D}}|0\rangle \quad , \qquad (8.42)$$

где

$$\widehat{\mathbf{D}} = \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} e\,\mathbf{r}_j \quad . \qquad (8.43)$$

Таким образом, если передаваемый импульс мал, то при неупругом рассеянии электронов преимущественно возбуждаются переходы $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$, удовлетворяющие правилам отбора для электромагнитных E1-переходов:

$$\begin{cases} L_\mathrm{n} = L_0 \pm 1, L_0; & \Delta L = 0{,}1; \\ J_\mathrm{n} = J_0 \pm 1, J_0; & \Delta J = 0{,}1; \\ \pi_\mathrm{n} = -\pi_0. \end{cases} \qquad (8.44)$$

Такие переходы называются оптически разрешенными или E1-переходами.

Состояния дискретного спектра атома — это (за исключением особого случая атома водорода) состояния с определенным значением углового момента. Опуская все, что связано со спином атомных электронов и налетающего электрона, рассмотрим возбуждение уровня с определенным орбитальным моментом L_n (пусть при этом L_0 — орбитальный момент атома в основном состоянии):

$$A(L_0) + e \to A^*(L_\mathrm{n}) + e' \quad . \qquad (8.45)$$

Если ориентация углового момента $\mathbf{L}_0$ неопределенна, а детектор реакции (8.45) нечувствителен к ориентации момента $\mathbf{L}_\mathrm{n}$, то дифференциальное сечение парциального перехода (8.39) вычисляется усреднением по всем направлениям $\mathbf{L}_0$ и суммированием по всем направлениям $\mathbf{L}_\mathrm{n}$:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_\mathrm{n}}{\mathrm{d}\Omega} =$$

$$= \frac{p_f}{p_i}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_\mathrm{R} \frac{1}{2L_0+1} \sum_{M_0, M_\mathrm{n}} |\langle \mathrm{n} L_\mathrm{n} M_\mathrm{n}| \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} |0 L_0 M_0\rangle|^2 \,. \qquad (8.46)$$

Разложим оператор по мультиполям (см. (3.4)):

$$\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} i^\lambda (2\lambda+1) \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{j}_\lambda(qr_j)\, \mathrm{P}_\lambda\left(\cos\theta_{qr_j}\right) =$$

$$= \sum_{\lambda,\mu} 4\pi i^{\lambda} \left[\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{j}_{\lambda}(qr_j) Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}}_j) \right] \mathrm{Y}^{*}_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}}_q) \quad , \quad (8.47)$$

здесь $\hat{\mathbf{n}}_j$ и $\hat{\mathbf{n}}_q$ — единичные векторы в направлении векторов $\mathbf{r}_j$ и $\mathbf{q}$, θ_{qr_j} — угол между этими направлениями. По теореме Вигнера — Эккарта [1, (56.5)] получаем

$$\langle \mathrm{n} L_{\mathrm{n}} M_{\mathrm{n}} | \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{j}_{\lambda}(qr_j) \mathrm{Y}_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}}_j) \, | 0 L_0 M_0 \rangle =$$

$$= \frac{(\lambda\mu \, L_0 M_0 | \, L_{\mathrm{n}} M_{\mathrm{n}})}{\sqrt{2L_{\mathrm{n}} + 1}} \langle \mathrm{n} L_{\mathrm{n}} || \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{j}_{\lambda}(qr_j) \mathrm{Y}_{\lambda}(\hat{\mathbf{n}}_j) || 0 L_0 \rangle \quad , (8.48)$$

где приведенный матричный элемент

$$\mathcal{F}^{(\lambda)}_{\mathrm{n}0}(q) \equiv \langle \mathrm{n} L_{\mathrm{n}} || \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{j}_{\lambda}(qr_j) \mathrm{Y}_{\lambda}(\hat{\mathbf{n}}_j) || 0 L_0 \rangle \qquad (8.49)$$

будем называть **мультипольным формфактором перехода**.

Подставляя (8.48) в (8.46) и используя известные свойства коэффициентов Клебша — Гордона [1, (41.19) и (Д 2.3)], выразим дифференциальное сечение парциального перехода $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$ через мультипольные формфакторы перехода:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{p_f}{p_i} \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \right)_{\mathrm{R}} \frac{4\pi}{2L_0 + 1} \sum_{\lambda} \left| \mathcal{F}^{(\lambda)}_{\mathrm{n}0}(q) \right|^2 = \sum_{\lambda} \frac{\mathrm{d}\sigma^{(\lambda)}_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega} \quad , (8.50)$$

здесь мы воспользовались также, формулой [1, (Д7.15)] для выполнения суммирования по магнитному квантовому числу μ; благодаря такому суммированию в (8.50) выпала зависимость от направления вектора переданного импульса $\mathbf{q}$.

Мультипольные формфакторы (8.49) ведут себя при малых q согласно степенному закону:

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}^{(\lambda)}(q)|_{q\ll 1/a}\sim q^{\lambda} \quad . \tag{8.51}$$

Поскольку дифференциальное сечение $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\,\Omega)_{\mathrm{R}}$ пропорционально $1/q^4$, получаем, что дифференциальные сечения парциальных переходов мультипольности λ, ведут себя при малых q согласно закону:

$$\left.\frac{d\sigma_{\mathrm{n}}^{(\lambda)}}{d\Omega}\right|_{q\ll 1/a} \sim \frac{1}{q^{4-2\lambda}} \quad . \tag{8.52}$$

Отсюда, как и из (8.42), снова видно, что в реакции (e,e') при малых q в спектрах возбуждения атома доминируют El-переходы. Заметим также, что при неупругом рассеянии, в отличие от упругого рассеяния, минимальный переданный импульс $q_{\min}=k_i-k_f$ всегда больше нуля. Поэтому дифференциальное сечение любого парциального перехода (e,e'), в отличие от $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\mathrm{R}}$, никогда не обращается в бесконечность при $\theta=0$.

Исследуем, как зависит вероятность оптически разрешенных переходов от энергии налетающих электронов. Полное сечение парциального перехода $|0\rangle\rightarrow|\mathrm{n}\rangle$ вычисляется интегрированием дифференциального сечения рассеяния $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}/\mathrm{d}\,\Omega$ по всем направлениям вылета рассеянного электрона:

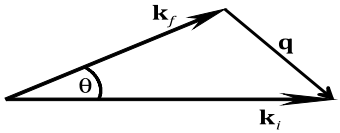


Рис. 8.1. Кинематика рассеяния электрона на атоме.

$$\sigma_{\mathrm{n}}=\int\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega}\mathrm{d}\Omega \quad . \tag{8.53}$$

Поскольку в борновском приближении $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}/\mathrm{d}\,\Omega$ зависит от углов рассеяния электрона через переданный

импульс q то удобно перейти в (8.53) к интегрированию по q (см. (2.24)):

$$\sigma_{\mathrm{n}} = \int \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega}\,\mathrm{d}\Omega = 2\pi \int\limits_{\mathrm{q_{min}}=k_i-k_f}^{\mathrm{q_{max}}=k_i+k_f} \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega}\frac{q\mathrm{d}q}{k_i k_f} \quad , \qquad (8.54)$$

здесь мы использовали соотношение

$$q^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos\theta \quad , \qquad (8.55)$$

следующее из треугольника векторов $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f$ и $\mathbf{q}$ (рис. 8.1). Если энергия возбуждения атома ε_{n} много меньше, чем энергия налетающих электронов E, то пределы интегрирования в (8.54) можно заменить их приближенными значениями:

$$\theta = 0 \qquad q_{\min} = k_i - k_f \to \frac{\mu\varepsilon_{\mathrm{n}}}{\hbar^2 k_i} = \frac{\sqrt{\mu}\varepsilon_{\mathrm{n}}}{\hbar\sqrt{2E}} \quad ,$$

$$\theta = \mathrm{p} \qquad q_{\max} = k_i + k_f \to 2k_i = 2\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \quad . \qquad (8.56)$$

При малых q дифференциальное сечение оптически разрешеного перехода ведет себя, согласно (8.52), как

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega} \sim \frac{1}{q^2} \quad . \qquad (8.57)$$

Чтобы фиксировать в (8.57) коэффициент пропорциональности, удобно вернуться к соотношениям (8.46), (8.40) и (8.42). В борновском приближении переходы $|0L_0M_0\rangle \to |\mathrm{n}L_{\mathrm{n}}\mathrm{M}_{\mathrm{n}}\rangle$ подчиняются строгому правилу отбора по проекции момента на направление вектора $\mathbf{q}$:

$$M_{\mathrm{n}} = M_0 \quad , \qquad (8.58)$$

а дифференциальное сечение оптически разрешенного перехода при малых q выражается через матричный

элемент оператора проекции электрического дипольного момента атома на ось квантования (т.е. на направление переданного импульса **q**):

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(q)|_{q\to 0} = \frac{i}{e} q\langle \mathrm{n}|\widehat{D}_z|0\rangle = iq\langle \mathrm{n}|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{z}_j\,|0\rangle \quad , \qquad (8.59)$$

где $z_j -$ проекция радиус-вектора атомного электрона на ось z. Этот же матричный элемент входит в так называемую **силу осциллятора** электромагнитного E1-перехода:

$$f_{\mathrm{n0}} = \frac{2\mathrm{m}_e \varepsilon_{\mathrm{n}}}{\hbar^2} |\langle \mathrm{n}| \sum_j z_j\,|0\rangle|^2 \ , \qquad (8.60)$$

где m_e –масса электрона. Подставляя (8.59) в (8.39), получаем

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{q\ll 1/a} = \frac{p_f}{p_i}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{R}} q^2 \left(\frac{\hbar^2 f_{\mathrm{n0}}}{2\mathrm{m}_e \varepsilon_{\mathrm{n}}}\right) \qquad (8.61)$$

Из (8.56) видно, что при малых углах рассеяния линейная аппроксимация формфактора $\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q})$, а следовательно, и формула (8.57) работают тем лучше, чем больше энергия E налетающего электрона. С другой стороны, именно область самых малых углов дает основной вклад в интеграл (8.54) Если распространить зависимость (8.57) на всю область интегрирования $q_{\min} \le q \le q_{\max}$, то для парциального сечения оптически разрешенного перехода получаем следующую аппроксимацию:

$$\sigma_{\mathrm{n}} \sim \frac{f_{\mathrm{n0}}}{E\varepsilon_{\mathrm{n}}} \ln\left(\frac{E}{\varepsilon_{\mathrm{n}}}\right). \qquad (8.62)$$

Эта формула называется **формулой Бете.**

§ 8.4. Плотность перехода. Связь между неупругими формфакторами и переходными плотностями

Неупругий формфактор $\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q})$, если он известен при всех значениях $\mathbf{q}$, несет в себе всю информацию о парциальном переходе $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$, необходимую и достаточную для исчерпывающего описания этого перехода в рамках борновского приближения. Эквивалентной структурной характеристикой того же перехода является так называемая переходная плотность, определяемая как функция пространственной координаты частицы. Будем для определенности говорить об электронной переходной плотности в атомах. Это — недиагональный матричный элемент оператора плотности частиц:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \delta\left(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}\right) \tag{8.63}$$

в обкладках начального и конечного состояний атома, между которыми совершается переход:

$$\rho_{\mathrm{n0}}(\mathbf{r}) = \langle \mathrm{n}|\hat{\rho}(\mathbf{r})|0\rangle = \langle \mathrm{n}|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \delta\left(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}\right)|0\rangle \quad . \tag{8.64}$$

Переходная плотность и неупругий формфактор перехода $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$ связаны между собой преобразованием Фурье:

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(\mathbf{q}) = \int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rho_{\mathrm{n0}}(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3 r \quad . \tag{8.65}$$

В предыдущем параграфе мы ввели разложение неупругого формфактора по мультиполям. Для состояний с определенным угловым моментом $|0\rangle = |0 L_0 M_0\rangle$ и $|\mathrm{n}\rangle = |\mathrm{n} L_{\mathrm{n}} M_{\mathrm{n}}\rangle$ из формул (8.47) и (8.49) имеем

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n0}}(q) = \langle \mathrm{n} L_{\mathrm{n}} M_{\mathrm{n}}| \sum_j \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} |0 L_0 M_0\rangle =$$

$$\sum_{\lambda\mu}\frac{4\pi i^{\lambda}}{\sqrt{2L_{\mathrm{n}}+1}}(\lambda\mu L_0 M_0|L_{\mathrm{n}}M_{\mathrm{n}})\mathcal{F}_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(q)\mathrm{Y}_{\lambda\mu}^{*}(\hat{\mathbf{n}}_q)\quad . \qquad (8.66)$$

Мультипольным формфакторам перехода $\mathcal{F}_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(q)$ соответствуют мультипольные компоненты переходных плотностей:

$$\rho_{\mathrm{n}0}(\mathbf{r})=\sum_{\lambda\mu}\frac{(\lambda\mu L_0 M_0|L_{\mathrm{n}}M_{\mathrm{n}})}{\sqrt{2L_{\mathrm{n}}+1}}\rho_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(r)\mathrm{Y}_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{n}})\quad , \qquad (8.67)$$

$$\rho_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(r)=$$

$$=\sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}}\langle L_{\mathrm{n}}||\frac{1}{r^2}\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}}\delta(r-r_j)\,\mathrm{P}_{\lambda}(\cos\theta_j)||L_0\rangle\ , \qquad (8.68)$$

а именно

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(q)\sim\int_0^{\infty}\mathrm{j}_{\lambda}(qr)\,\rho_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(r)r^2\mathrm{d}r \qquad (8.69)$$

и обратно

$$\rho_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(r)\sim\int_0^{\infty}\mathrm{j}_{\lambda}(qr)\,\mathcal{F}_{n0}^{(\lambda)}(q)q^2\mathrm{d}q\quad . \qquad (8.70)$$

Из последнего соотношения видно, что при малых r переходные плотности ведут себя согласно степенному закону:

$$\rho_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(r)|_{r\to 0}\sim r^{\lambda}\quad . \qquad (8.71)$$

Согласно соотношению (8.49), мультипольные формфакторы перехода удовлетворяют своеобразному условию «нормировки»:

$$\mathcal{F}_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}(q)|_{q\to 0}\approx Q_{\mathrm{n}0}^{(\lambda)}q^{\lambda}\quad , \qquad (8.72)$$

$$Q_{\mathrm{n0}}^{(\lambda)} = \langle \mathrm{n}L_{\mathrm{n}} \| \sum_j r_j^{\lambda} \mathrm{Y}_{\lambda}(\hat{\mathrm{n}}_j) \| 0L_0 \rangle \quad .$$

где $Q_{\mathrm{n0}}^{(\lambda)}$ приведенный матричный элемент оператора мультипольного момента атома:

$$\hat{Q}_{\mathrm{n0}}^{(\lambda)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}} \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} r_j^{\lambda} \mathrm{Y}_{\lambda 0}(\hat{\mathbf{n}}_{\mathrm{j}}) \quad . \qquad (8.73)$$

То же условие, записанное для переходной плотности, имеет вид

$$\int_0^{\infty} \rho_{\mathrm{n0}}^{\lambda}(r) r^{\lambda+2} \mathrm{d}r = Q_{\mathrm{n0}}^{(\lambda)} \quad . \qquad (8.74)$$

Упражнения

8.1. Пользуясь борновским приближением, исследовать характер углового распределения электронов, упруго рассеянных атомом водорода.

8.2. В приближении эффективного заряда [1, § 46] рассчитать электронный формфактор атома гелия. Сравнить его с формфактором, рассчитанным с водородоподобными волновыми функциями при $\mathrm{Z} = 2$. Пользуясь борновским приближением, исследовать, как влияет взаимное отталкивание между атомными электронами на характер углового распределения быстрых электронов, упруго рассеянных атомом гелия.

8.3. Используя модель независимых частиц с осцилляторными волновыми функциями, рассчитать зарядовые формфакторы магических ядер ^{4}He и ^{16}O. Пользуясь борновским приближением, указать качественные различия в форме дифференциальных сечений упругого рассеяния быстрых электронов на этих ядрах. Сравнить с результатами упр. 2.5.

8.4. Пользуясь борновским приближением и считая, что нуклон-нуклонные $\mathrm{nn}-$ и np -взаимодействия описыва-

ются потенциалом Юкавы $V_{12} = -V_0 \mathrm{e}^{-\alpha r_{12}}/r_{12}$, найти дифференциальное сечение упругого рассеяния быстрых нейтронов ядрами ^{4}He. Плотность вещества в основном состоянии ядра ^{4}He рассчитать в рамках модели независимых частиц с осцилляторными волновыми функциями. Отдачей ядра пренебречь.

8.5. Решить задачу 8.4 для быстрых протонов, учитывая ядерное и кулоновское взаимодействия налетающего протона с нуклонами ядра. Указать качественные различия в форме дифференциальных сечений упругого рассеяния нейтронов и протонов.

8.6. Вычислить мультипольные компоненты переходной плотности для следующих переходов атома водорода: а) $1s \to 2p$, б) $1s \to 3p$, в) $2p \to 3d$, г) $2p \to 3p$.

8.7. Пользуясь борновским приближением, вычислить дифференциальное сечение возбуждения быстрыми электронами уровня $\mathrm{n} = 2$ атома водорода. Как меняется в зависимости от угла рассеяния электрона относительный вклад состояний $2s$ и $2p$ в эту величину?

8.8. Вычислить полное сечение возбуждения быстрыми электронами уровня $\mathrm{n} = 2$ атома водорода. Как меняется в зависимости от энергии электронов относительный вклад состояний $2s$ и $2p$ в эту величину?

8.9. Вычислить переходную плотность для перехода из основного состояния $(1s^2)$ ^{1}S в состояние $(1s2p)$ ^{1}P атома гелия. Волновую функцию возбужденного состояния построить согласно модели независимых частиц с эффективными зарядами:

$$\mathrm{Z_{eff}}(1s) = 2,\ \mathrm{Z_{eff}}(2p) = 1.$$

8.10. Выразить силу осциллятора f_{n0} электромагнитного E1-перехода в атоме через плотность перехода $\rho_{\mathrm{n0}}^{(1)}(r)$.

Лекция 9. Правила сумм в теории столкновений. Приближение полноты

§ 9.1. Роль правил сумм в атомной и ядерной физике. «Динамические» правила сумм в теории столкновений

Правила сумм — это особого рода интегральные соотношения для вероятностей возбуждения многочастичных систем, основанные на свойстве полноты их волновых функций. Особую ценность представляют правила сумм, носящие модельно независимый характер.

Примером является известное правило сумм для атомного фотоэффекта.

Пусть f_{n0} — сила осциллятора (8.60) электромагнитного E1 −перехода $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$. Вычислим сумму значений f_{n0} по всем возбужденным состояниям атома, относящимся и к дискретному, и к непрерывному спектру:

$$\sum_{\mathrm{n}} f_{\mathrm{n0}} = \frac{2m_e}{\hbar^2} \sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}} \left|\langle \mathrm{n}| \sum_j z_j |0\rangle\right|^2 \quad . \tag{9.1}$$

Для этого воспользуемся соотношением (8.2), где в качестве оператора $\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}$ возьмем гамильтониан изолированного атома:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}} = \sum_{i=1}^{\mathrm{Z}} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_{\mathrm{Z}}) \quad . \tag{9.2}$$

Учитывая, что ε_{n} — это энергия возбуждения атома, отсчитываемая от его основного состояния ($\varepsilon_0 = 0$), заметим, что для любого оператора $\hat{F}$, взятого в обкладках собственных состояний оператора $\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}$, справедливы тождества:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathrm{n}} \langle \mathrm{n}|\hat{F}|0\rangle &= \langle \mathrm{n}|\left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \hat{F}\right]|0\rangle \ , \\ \varepsilon_{\mathrm{n}} \langle 0|\hat{F}|\mathrm{n}\rangle &= -\langle 0|\left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \hat{F}\right]|\mathrm{n}\rangle \ . \end{aligned} \tag{9.3}$$

Используя их, произведем тождественные преобразования суммы (9.1):

$$\sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}} \left|\langle \mathrm{n}| \sum_{j} z_j \left|0\right\rangle\right|^2 =$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}} \langle 0| \sum_{j'} z_{j'} \left|\mathrm{n}\right\rangle \langle \mathrm{n}| \sum_{j} z_j \left|0\right\rangle + \right.$$

$$\left. + \sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}} \langle 0| \sum_{j} z_j \left|\mathrm{n}\right\rangle \langle \mathrm{n}| \sum_{j'} z_{j'} \left|0\right\rangle \right\} =$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\sum_{\mathrm{n}} \langle 0| \sum_{j} z_j \left|\mathrm{n}\right\rangle \langle \mathrm{n}| \left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \sum_{j'} z_{j'}\right] \left|0\right\rangle - \right. \qquad (9.4)$$

$$\left. - \sum_{\mathrm{n}} \langle 0| \left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \sum_{j'} z_{j'}\right] \left|\mathrm{n}\right\rangle \langle \mathrm{n}| \sum_{j} z_j \left|0\right\rangle \right\} =$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\langle 0| \left(\sum_{j} z_j\right) \left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \sum_{j'} z_{j'}\right] \left|0\right\rangle - \right.$$

$$\left. - \langle 0| \left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \sum_{j'} z_{j'}\right] \left(\sum_{\mathrm{j}} z_j\right) \left|0\right\rangle \right\} =$$

$$= \frac{1}{2} \langle 0| \left[\sum_{j} z_j, \left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \sum_{j'} z_{j'}\right]\right] \left|0\right\rangle \quad .$$

Таким образом, сумма сил осцилляторов по бесконечному полному набору возбужденных состояний сводится к среднему значению двойного коммутатора $\left[\widehat{D}_z, \left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \widehat{D}_z\right]\right]$ в основном состоянии атома.

При вычислении этого среднего воспользуемся тем, что оператор кулоновского взаимодействия электронов с ядром и электронов между собой коммутирует с оператором координат электрона:

$$\left[V(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_{\mathrm{Z}}), z_j\right] = 0 \ ; \qquad (9.5)$$

остальная часть двойного коммутатора вычисляется явно:

$$\left[z_j\ ,\left[\sum_{i=1}^{\mathrm{Z}}\frac{p_i^2}{2m_e}\ ,z_{j'}\right]\right]=\frac{\hbar^2}{m_e}\delta_{jj'}\quad ,\qquad (9.6)$$

В итоге получаем

$$\sum_{\mathrm{n}} f_{\mathrm{n0}}=\mathrm{Z}\quad .\qquad (9.7)$$

Соотношение (9.7) для многоэлектронного атома называется **правилом сумм Томаса — Райхе — Куна**.

В качестве другого примера рассмотрим правило сумм для электрических дипольных переходов в ядрах.

Оператор электрического дипольного момента ядра имеет вид

$$\mathbf{D}=\sum_{p=1}^{\mathrm{Z}}e_p\mathbf{r}_p+\sum_{n=1}^{\mathrm{N}}e_n\mathbf{r}_n\qquad ,\qquad (9.8)$$

где $\mathbf{r}_p$ и $\mathbf{r}_n$ — операторы координат протонов и нейтронов, а e_p и e_n — эффективные заряды нуклонов в E1 −переходах, которые, как известно из ядерной физики, имеют значения:

$$e_p=\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{A}}e\ ;\quad e_n=-\frac{\mathrm{Z}}{\mathrm{A}}e\quad .\qquad (9.9)$$

Определим силу осциллятора парциального E1 −перехода в ядре по аналогии с (8.60):

$$f_{\mathrm{n0}}=\frac{2m\varepsilon_{\mathrm{n}}}{\hbar^2}\left|\langle\mathrm{n}|\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{A}}\sum_{p=1}^{\mathrm{Z}}z_p-\frac{\mathrm{Z}}{\mathrm{A}}\sum_{n=1}^{\mathrm{N}}z_n\,|0\rangle\right|^2\quad ,\qquad (9.10)$$

где m — это теперь масса нуклона. Суммирование сил осцилляторов по всем возбужденным состояниям ядра производится в принципе так же, как это было сделано выше для атома. Однако при вычислении двойного коммутатора $\left[\mathbf{D},\left[\widehat{\mathcal{H}},\mathbf{D}\right]\right]$, аналогичного тому, что получен в

(9.4), появляются существенные различия. Благодаря наличию обменных сил между нуклонами оператор полной потенциальной энергии ядра не коммутирует, вообще говоря, с оператором координат нуклона. Поэтому сумма сил осцилляторов в ядре не сводится, в общем случае, к какому-либо модельно независимому выражению. Лишь если пренебречь обменным взаимодействием, можно получить результат того же типа, что и соотношение (9.7):

$$\sum_{\mathrm{n}} f_{\mathrm{n0}} = \mathrm{ZN/A} \quad . \tag{9.11}$$

Применяя квантовую теорию столкновений к описанию ядерных реакций или атомных процессов, мы часто обращаемся непосредственно к правилам сумм (9.7) или (9.11), используя предельные соотношения типа (8.61), которые связывают вероятность парциальных переходов в атомах или ядрах под действием налетающих частиц с соответствующими силами осцилляторов. Большое распространение получили также так называемые **динамические правила сумм**, устанавливаемые для операторов, которые, в отличие от рассмотренных выше операторов дипольного момента атома или ядра, зависят от переданного импульса или других динамических параметров, характеризующих процесс столкновения. Рассмотрим одно из таких соотношений.

Пусть $\rho_{\mathrm{n0}}(\mathbf{x})$ — переходная плотность, связывающая основное и возбужденное состояния некоторой составной системы. Используя (9.3), легко доказать тождество

$$\sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}}\, \rho_{\mathrm{n0}}(\mathbf{x})\rho_{\mathrm{n0}}(\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\langle 0|\left[\hat{\rho}(\mathbf{x}),\left[\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \hat{\rho}(\mathbf{y})\right]\right]|0\rangle \quad , \tag{9.12}$$

где $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ — произвольные точки, а $\hat{\rho}(\mathbf{x})$ — оператор плотности частиц в точке $\mathbf{x}$:

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{A} \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{x}) \quad . \tag{9.13}$$

Если гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_A$ имеет вид (9.2) и, в частности, не содержит обменных операторов, то двойной коммутатор в правой части формулы (9.12) вычисляется непосредственно:

$$\left[\hat{\mathcal{H}}_A, \hat{\rho}(\mathbf{y})\right] = \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m}, \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{y})\right] =$$

$$= -\frac{i\hbar}{m} \sum_j \hat{\mathbf{p}}_j \nabla \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{y}) \ , \tag{9.14}$$

и далее

$$\frac{1}{2}\langle 0| \left[\hat{\rho}(\mathbf{x}), \left[\hat{\mathcal{H}}_A, \hat{\rho}(\mathbf{y})\right]\right] |0\rangle =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x \nabla_y \langle 0| \sum_j \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{x}) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{y}) |0\rangle \ . \tag{9.15}$$

В итоге мы получаем правило сумм для переходных плотностей (T.I.Deal, S.Fallieros, 1973):

$$\sum_n \varepsilon_n \rho_{n0}(\mathbf{x}) \rho_{n0}(\mathbf{y}) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x \nabla_y \{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho_0(\mathbf{x})\} \ ; \tag{9.16}$$

здесь $\rho_0(\mathbf{x}) = \langle 0|\hat{\rho}(\mathbf{x})|0\rangle$ — функция распределения плотности частиц в основном состоянии системы.

Из формулы (9.16) вытекает ряд полезных соотношений более частного характера. Рассмотрим переходы, возбуждаемые некоторым возмущением, которому соответствует локальный оператор следующей формы:

$$\hat{F} = \sum_i f(\mathbf{r}_i) \tag{9.17}$$

(такие операторы, представляющие собой сумму идентичных слагаемых по всем частицам, называются одночастичными). В соответствии с определением (9.13) выразим $\hat{F}$ через оператор плотности частиц:

$$\hat{F} = \int f(\mathbf{x})\hat{\rho}(\mathbf{x})\mathrm{d}^3x \qquad (9.18)$$

Комбинируя соотношения (9.16) и (9.18), легко получить

$$\sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}}\rho_{\mathrm{n}0}(\mathbf{x})\langle \mathrm{n}|\hat{F}|0\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\{\nabla f(\mathbf{x})\rho_0(\mathbf{x})\} \quad . \qquad (9.19)$$

Записанное в импульсном представлении соотношение (9.19) становится правилом сумм для неупругих формфакторов. Выбирая в качестве $\hat{F}$ различные операторы мультипольных моментов системы, можно получить правила сумм для соответствующих мультипольных формфакторов (см. упр. 9.2).

§ 9.2. Некогерентное рассеяние быстрых электронов на атомах. Связь вероятности рассеяния с парной корреляционной функцией

Часто дифференциальное сечение рассеянных быстрых протонов на ядрах измеряется в условиях, когда недостаточная чувствительность детекторов или недостаточная монохроматизация падающего пучка не позволяет разделить вклады отдельных парциальных переходов. Имея в виду такие измерения, вычислим вероятность неупругого рассеяния электронов атомом безотносительно к тому, в каком состоянии остается атом после столкновения. По-прежнему будем пользоваться борновским приближением.

Итак, речь идет о величине

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{incoh}}}{\mathrm{d}\Omega} \equiv \sum_{\mathrm{n}\neq 0} \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega} \quad , \qquad (9.21)$$

где суммирование охватывает все возбужденные состояния атома как дискретного, так и непрерывного спектра. Значок «incoh» соответствует термину «некогерентный», смысл которого в данном случае мы увидим чуть ниже. Подставляя в качестве дифференциального сечения парциального перехода $\mathrm{d}\sigma_\mathrm{n}/\mathrm{d}\Omega$ выражение (8.39), получаем

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_\mathrm{incoh}}{\mathrm{d}\Omega} = \sum_{\mathrm{n}\neq 0} \frac{p_f}{p_i} \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_\mathrm{R} \left| \langle \mathrm{n} | \sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} |0\rangle \right|^2 \quad . \qquad (9.22)$$

Эта формула записана не совсем точно; при фиксированных значениях энергии (импульса) падающих электронов и угла рассеяния (что соответствует стандартной постановке эксперимента) величина импульса рассеянного электрона, а также переданный импульс (который, не будем забывать, входит не только в показатель экспоненты, но и в фактор $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_\mathrm{R}$), зависят от энергии возбуждения атома ε_n в конечном состоянии. Таким образом, строго говоря, индекс конечного состояния атома $|\mathrm{n}\rangle$ следовало бы приписать величинам p_f, q и $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_\mathrm{R}$ входящим в (9.22). Мы, однако, пренебрежем этой зависимостью, для чего примем, что средняя энергия возбуждения атома много меньше, чем энергия налетающих электронов, а угол рассеяния мал:

$$\bar{\varepsilon}_\mathrm{n} \ll E \quad , \quad \theta \ll 1 \quad . \qquad (9.23)$$

При таком условии из (8.55) и (8.11) получаем

$$q = \sqrt{2m\left[E + (E - \varepsilon_\mathrm{n}) - 2\sqrt{E(E-\varepsilon_\mathrm{n})}\cos\theta\right]} \approx k_i\theta \; ; \qquad (9.24)$$

направление вектора q при выполнении условия (9.23) также не зависит от ε_n.

Полагая далее, что в (9.22) входят некоторые средние значения q и $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\mathrm{R}}$, выполним суммирование по n, учитывая свойство полноты состояний атома:

$$\sum_{\mathrm{n}\neq 0}\left|\langle \mathrm{n}|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}\,|0\rangle\right|^2 =$$

$$= \sum_{\mathrm{n}}\left|\langle \mathrm{n}|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}\,|0\rangle\right|^2 - \left|\langle 0|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}\,|0\rangle\right|^2 =$$

$$= \sum_{\mathrm{n}}\langle 0|\sum_{j=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}\,|\mathrm{n}\rangle\langle \mathrm{n}|\sum_{i=1}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}\,|0\rangle - \mathrm{Z}^2|\mathcal{F}_e(q)|^2 =$$

$$= \langle 0|\sum_{ij}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)}\,|0\rangle - \mathrm{Z}^2|\mathcal{F}_e(q)|^2 \quad ; \qquad (9.25)$$

здесь $\mathcal{F}_e(q)$ — формфактор плотности электронов в основном состоянии атома (см. 8.31). Подставляя (9.25) в (9.22) и выделяя в двойной сумме Σ_{ij} члены с $j = i$ окончательно получаем

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{incoh}}}{\mathrm{d}\Omega} =$$

$$= \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{R}}\left\{\mathrm{Z} + \langle 0|\sum_{i\neq j}^{\mathrm{Z}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)}\,|0\rangle - \mathrm{Z}^2|\mathcal{F}_e(q)|^2\right\}. \qquad (9.26)$$

Проанализируем полученное выражение. Общие свойства упругих формфакторов атомов $\mathcal{F}_e(q)$ были рассмотрены в предыдущей лекции. Мы видели, в частности, что скорость его убывания с ростом q определяется, прежде всего, средними размерами атома a. Все многочастичные эффекты атомной структуры проявляются в свойствах упругих формфакторов как эффекты высших порядков на фоне основных особенностей, определяемых распреде-

лением средней плотности заряда. Что касается второго слагаемого входящего в (9.26), то его поведение в зависимости от q непосредственно определяется характером парных корреляций между электронами в основном состоянии атома. Это хорошо видно из следующего фурье-преобразования:

$$\langle 0|\sum_{i\neq j}^{Z} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)}|0\rangle = \int e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')d^3r d^3r' , \qquad (9.27)$$

где

$$\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \langle 0|\sum_{i\neq j}^{Z}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_i)|0\rangle \qquad (9.28)$$

парная корреляционная функция электронов в атоме. Свойства парной корреляционной функции атома или ядра характеризуются в первую очередь величиной среднего относительного расстояния между двумя частицами («корреляционная длина»), на котором их движение не является независимым. Корреляция между двумя частицами может быть обусловлена их непосредственным («остаточным») взаимодействием, не вошедшим в среднее самосогласованное поле атома или ядра; таково, например, сильное отталкивание между нуклонами в ядре на малых расстояниях. В таком случае корреляционная длина l_c это, по существу, радиус остаточного взаимодействия. Большое значение для структуры атомов и ядер имеют так называемые **паулевские корреляции**, которые связаны с эффективным отталкиванием частиц на близких друг к другу расстояниях, связанных с принципом Паули (см. упр. 9.3).

Итак, в условиях (9.23) дифференциальное сечение неупругого рассеяния быстрых электронов, просуммированное по всем возбужденным состояниям атома, определяется распределением электронной плотности и свойства-

ми парной корреляционной функции в основном состоянии атома. При больших переданных импульсах ($q \gg 1/a$; $q \gg 1/l_c$) и второй, и третий члены в (9.26) пропадают:

$$\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{incoh}}/\mathrm{d}\Omega \to \mathrm{Z}\,(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\mathrm{R}} \quad , \qquad (9.29)$$

т.е. падающий электрон рассеивается атомом как системой независимых Z электронов. Это и объясняет введенный нами термин «некогерентное рассеяние».

§ 9.3. Средняя энергия, теряемая частицей при некогерентном рассеянии. Понятие квазисвободного взаимодействия

Пусть быстрая частица неупруго рассеивается мишенью (атомом, ядром), содержащей N частиц одинаковой массы m. Продолжая рассмотрение, начатое в предыдущем параграфе, вычислим, пользуясь борновским приближением, среднюю энергию, которую теряет быстрая частица на возбуждение мишени при некогерентном рассеянии:

$$\bar{\varepsilon}_{\mathrm{n}} = \left(\sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}} \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega}\right) \Big/ \left(\sum_{\mathrm{n}} \frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega}\right) . \qquad (9.30)$$

Суммирование по n в знаменателе дает сечение $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{incoh}}/\mathrm{d}\Omega$ (формула (9.26) или (9.29)). Выполним суммирование по n в числителе. Для этого воспользуемся соотношением типа (9.4) и (9.12), которое легко вывести непосредственно с помощью условия полноты:

$$\sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}} \left| \langle \mathrm{n} | \sum_{j} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} |0\rangle \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{2} \langle 0 | \left[\sum_{j} \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j}, \left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \sum_{k} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_k} \right] \right] |0\rangle \quad . \qquad (9.31)$$

Дальнейшие непосредственные вычисления дают

$$\left[\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{A}}, \sum_k \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_k}\right] = \frac{\hbar q}{2m}\sum_k \left\{\mathbf{p}_k \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_k} + \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_k}\mathbf{p}_k\right\}; \quad (9.32)$$

$$\sum_{\mathrm{n}} \varepsilon_{\mathrm{n}} \left|\langle \mathrm{n}| \sum_j \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} |0\rangle\right|^2 =$$

$$= \frac{(\hbar q)^2}{2m}\langle 0| \sum_j (1) |0\rangle = \frac{(\hbar q)^2}{2m}\mathrm{Z} \ , \quad (9.33)$$

где Z — число частиц, составляющих систему, с которой сталкивается падающая быстрая частица (число электронов в атоме).

Ранее мы установили (см. (9.29)), что при больших переданных импульсах ($q \gg 1/a$) знаменатель в (9.30) сводится к сумме дифференциальных сечений рассеяния на отдельных электронах атома. Подставляя (9.29) и (9.33) в (9.30), получаем

$$\bar{\varepsilon}|_{q\gg 1/a} = (\hbar q)^2/(2m) \ . \quad (9.34)$$

Соотношение (9.34) еще глубже раскрывает характер некогерентного рассеяния: средняя энергия, потерянная частицей при столкновении, определяется просто величиной потерянного ею импульса; это есть кинетическая энергия одной из частиц мишени, принявшей на себя весь импульс q. Таким образом, при больших переданных импульсах некогерентное рассеяние ярко обнаруживает — независимо от конкретных свойств волновых функций системы — черты «квазисвободного» («квазиупругого») взаимодействия налетающей частицы с отдельными частицами, составляющими мишень.

Средняя энергия, потерянная частицей, — это основная, самая простая характеристика процесса некогерентного рассеяния. Более детальное представление о процессе рассеяния, а также о свойствах мишени, с которой происходит столкновение, можно получить,

исследуя ширину разброса потерянной энергии вокруг ее среднего значения. Количественно ее можно охарактеризовать с помощью дисперсии распределения:

$$D_\varepsilon = \overline{(\varepsilon - \bar{\varepsilon})^2} = \left(\sum_{n\neq 0} (\varepsilon_n - \bar{\varepsilon})^2 \frac{d\sigma_n}{d\Omega}\right) \Big/ \left(\sum_{n\neq 0} \frac{d\sigma_n}{d\Omega}\right) \quad . \quad (9.35)$$

В отличие от средней потерянной энергии $\bar{\varepsilon}$ величина дисперсии D_ε, сильно зависит от свойств системы (мишени), с которой сталкивается налетающая частица. С помощью условия полноты можно, в частности, показать, что величина D_ε, тем больше, чем больше средний импульс частицы мишени в основном состоянии мишени (см. упр. 9.4).

Упражнения

9.1. Получить соотношение (9.11).

9.2. Используя (9.19), получить динамическое правило сумм для монопольных переходов (E.T.Kao, S.Fallieros, 1970):

$$\sum_n \varepsilon_n M_{n0} \mathcal{F}_{n0}(q) = \frac{\hbar^2}{m} q^2 \frac{d}{dq^2} \mathcal{F}(q) \quad ; \qquad (9.36)$$

здесь

$$M_{n0} = \langle n | \sum_i r_i^2 | 0 \rangle$$

— матричный элемент оператора монопольного перехода, $\mathcal{F}_{n0}(q)$ — соответствующий переходный формфактор, $\mathcal{F}(q)$ — формфактор плотности частиц в основном состоянии.

9.3. Вычислить корреляционный интеграл

$$\langle 0 | \sum_{j\neq i} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} | 0 \rangle$$

для ферми-газа одинаковых частиц с массой m. Указать параметр, играющий роль корреляционной длины l_c. Оценить величину l_c для ядерного вещества, рассматривая его как ферми-газ нуклонов.

9.4. Быстрые электроны рассеиваются заряженной частицей массы m, удерживаемой вблизи точки $r = 0$ упругой силой. Пользуясь борновским приближением и считая, что энергия кванта колебаний $\hbar\omega$ много меньше, чем энергия налетающего электрона, исследовать форму энергетического спектра рассеянных электронов при малых и при больших переданных импульсах. Как зависит ширина разброса потерянной электроном энергии от свойств основного состояния осциллятора?

Лекция 10. Основные понятия многоканальной теории рассеяния

§ 10.1. Уравнения метода сильной связи каналов. Асимптотические условия

Рассмотрим процесс столкновения (8.1), не прибегая к упрощениям, свойственным теории возмущений. Пусть, как и в § 8.1, ξ — это набор внутренних переменных мишени A, а $\mathbf{r}$ — пространственная координата частицы x, которая сталкивается с мишенью. По-прежнему пренебрежем тождественностью частиц, спиновыми эффектами и эффектами отдачи.

Оператор взаимодействия частицы с мишенью $\hat{V} = \hat{V}(\xi, \mathbf{r})$, вообще говоря, недиагонален по состояниям мишени $|\mathrm{n}\rangle$. Значит, взаимодействие частиц с мишенью может переводить мишень из одного состояния в другое, причем, когда это взаимодействие достаточно велико, мишень, обмениваясь энергией с частицей x, может совершать такие переходы многократно, пока не окажется в том или ином конечном состоянии. Пусть частица x сталкивается с мишенью, находящейся в основном состоянии $|0\rangle$. Если в результате столкновения мишень

останется по-прежнему в основном состоянии, т.е. если происходит упругое рассеяние $x + A \to x + A$, то будем говорить, что в конечном состоянии мы имеем систему $x + A$ в **упругом канале**. Если мишень перешла в какое-то другое состояние $|\mathrm{n}\rangle \neq |0\rangle$ (неупругое рассеяние $x + A \to x' + A^*$), то будем говорить, что в конечном состоянии мы имеем систему $x + A$ в **неупругом канале**.

Понятие канала характеризует систему $x + A$ на большом взаимном расстоянии, когда взаимодействие частицы x с мишенью A уже не существенно. На близком же расстоянии, там, где действует оператор $\hat{V}(\xi, \mathbf{r})$, различные каналы оказываются связанными между собой, и сказать, из в каком из них находится система, невозможно. Теория столкновений, в которой учитывается связь между разными каналами рассеяния, называется **многоканальной теорией рассеяния**. Вариант этой теории, в котором, без каких-либо аппроксимаций, строго учитывается связь между ограниченным числом каналов, а влияние всех прочих каналов просто отбрасывается, называется **методом сильной связи каналов**. Получим основные уравнения этого метода.

В стационарной теории столкновений процесс рассеяния описывается волновой функцией всей системы $x + A$, удовлетворяющей стационарному уравнению Шредингера:

$$\hat{H}\Psi(\xi, \mathbf{r}) = E\Psi(\xi, \mathbf{r}) \quad , \qquad (10.1)$$

где полный гамильтониан системы $\hat{H}$ дается формулами (8.5), (8.6). Волновые функции $|\mathrm{n}\rangle = \Phi_{\mathrm{n}}(\xi)$, описывающие различные состояния мишени, образуют полный набор. Волновую функцию всей системы $\Psi(\xi, \mathbf{r})$ можно разложить по этому набору:

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}) = \sum \mathrm{u}_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})\Phi_{\mathrm{n}}(\xi) \quad , \qquad (10.2)$$

здесь символ Σ, как и в (8.4), обозначает суммирование по дискретному спектру и интеграл по непрерывному спектру состояний мишени (в отличие от § 8.1 основному состоянию мишени припишем индекс $n = 1$; при этом сохраним отсчет энергии системы от этого состояния, таким образом, положим $\varepsilon_1 = 0$). Функции $u_n(\mathbf{r})$, зависящие от координаты налетающей частицы $\mathbf{r}$, называются **канальными функциями**.

Чтобы перейти к методу сильной связи, надо оставить в (10.2) конечное число каналов, соответствующих каким-то определенным дискретным состояниям мишени (в том числе, конечно, и основному состоянию):

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}) = \sum_n u_n(\mathbf{r})\Phi_n(\xi) \ . \qquad (10.3)$$

Для отбора состояний, наиболее существенных в каждом отдельном случае, не существует каких-либо абсолютно четких критериев. Это зависит и от энергии налетающих частиц, и от того, какой канал рассеяния представляет наибольший интерес в рассматриваемой конкретной задаче. Из общих соображений ясно, что в первую очередь следует включить в (10.3) те каналы, которые наиболее сильно связаны взаимодействием $\hat{V}(\xi, \mathbf{r})$ с входным (упругим) и выходным каналами. Большое значение имеет также, насколько близко расположены соответствующие уровни мишени к уровню конечного состояния мишени или к его основному состоянию.

Подставим (10.2) в уравнение Шредингера (10.1). Учитывая ортонормированность состояний $|n\rangle$, получаем систему связанных уравнений для канальных функций $u_n(\mathbf{r})$:

$$\left(\hat{h}_n - E\right)u_n(\mathbf{r}) = -\sum_{m \neq n} V_{nm}(\mathbf{r})\, u_m(\mathbf{r}) \quad ; \qquad (10.4)$$

здесь мы ввели обозначения:

$$\hat{h}_{\mathrm{n}} = \hat{K} + \varepsilon_{\mathrm{n}} + V_{\mathrm{nn}}(\mathbf{r}) \qquad (10.5)$$

— гамильтониан взаимодействия частицы с мишенью в $\mathrm{n}-$ом канале; $\hat{K} = \hat{p}^2/(2\mu)$ — оператор кинетической энергии частицы;

$$V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r}) = V^*_{\mathrm{mn}}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathrm{n}|\hat{V}|\mathrm{m}\rangle = \\ = \int \Phi^*_{\mathrm{n}}(\xi)\, \hat{V}(\xi, \mathbf{r}) \Phi_{\mathrm{m}}(\xi)\, \mathrm{d}\xi \qquad (10.6)$$

— матрица оператора взаимодействия частицы x с мишенью A в обкладках волновых функций мишени.

Система (10.4) решается со следующими асимптотическими условиями:

$$\mathrm{u}_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \\ = \begin{cases} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} + \text{расходящаяся волна, если } \mathrm{n} = 1\ ; \\ \text{расходящаяся волна, если } \mathrm{n} > 1, E > \varepsilon_{\mathrm{n}}; \\ \text{затухающая волна, если } \mathrm{n} > 1, E < \varepsilon_{\mathrm{n}}\ . \end{cases} \qquad (10.7)$$

Первая строка соответствует физическому условию, что на мишень, находящуюся в состоянии $|1\rangle$, из бесконечности падает поток частиц x с импульсом $\mathbf{k}_1$. Вторая строка относится к неупругим каналам, переход в которые разрешен с точки зрения закона сохранения энергии системы: энергия возбуждения соответствующих уровней мишени ε_{n} меньше, чем кинетическая энергия падающих частиц на бесконечности; это так называемые **открытые каналы**. Третья строка относится к **закрытым каналам**; энергии падающей частицы E недостаточно, чтобы перевести мишень в соответствующее возбужденное состояние.

С математической точки зрения система (10.4) представляет собой систему связанных дифференциальных уравнений 2-го порядка. Легко показать, что она вместе с

дополнительными условиями (10.7), эквивалентна системе интегральных уравнений:

$$\mathrm{u_n}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathrm{n}1}\psi^{(+)}_{1,k_1}(\mathbf{r}) + \\ + \sum_{\mathrm{m}\neq\mathrm{n}} \int G^{(+)}_{\mathrm{n}}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r}')\,\mathrm{u_m}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r' \quad , \qquad (10.8)$$

где $G^{(+)}_{\mathrm{n}}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ — функция Грина одночастичной задачи, описывающая движение частицы x в канале n без учета его связи с другими каналами. Для нее справедливо уравнение (1.10):

$$\left(\hat{h}_{\mathrm{n}} - E\right)G^{(+)}_{\mathrm{n}}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad . \qquad (10.9)$$

Согласно (6.20), асимптотика функции Грина $G^{(+)}_{\mathrm{n}}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ имеет вид

$$G^{(+)}_{\mathrm{n}}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\Big|_{r\to\infty} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{n}}r}}{r}\left[\psi^{(-)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}'_{\mathrm{n}}}(\mathbf{r}')\right]^* , \qquad (10.10)$$

где $\mathbf{k}'_{\mathrm{n}} = k'_{\mathrm{n}}\mathbf{r}/r$ — вектор импульса рассеянной частицы в канале n, а $\psi^{(-)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}(\mathbf{r}')$ — соответствует гамильтониану $\hat{h}_{\mathrm{n}}$ и удовлетворяет, вместе с $\psi^{(+)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}(\mathbf{r})$, уравнению

$$\left(\hat{h}_{\mathrm{n}} - E\right)\psi^{(\pm)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}(\mathbf{r}) = 0 \quad , \qquad (10.11)$$

$$\psi^{(+)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}(\mathbf{r})\Big|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_{\mathrm{n}}\mathbf{r}} + f_{\mathrm{n}}(\theta)\frac{\mathrm{e}^{+ik_{\mathrm{n}}r}}{r} \quad .$$

Частным случаем функции $\psi^{(+)}_{\mathrm{n},\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}(\mathbf{r})$ с расходящейся волной является входящая в (10.8) одночастичная волновая функция $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$, которая представляет собой точное решение задачи об упругом рассеянии частицы на мишени, если пренебречь влиянием на него всех неупругих каналов.

Итак, многоканальная задача рассеяния допускает как дифференциальную, так и интегральную формули-

ровку. В обоих случаях в ее решение входит в качестве вспомогательного элемента задача потенциального рассеяния (10.11) — об упругом рассеяний частицы на мишени, находящейся в определенном (не только в основном, но и в том или ином возбужденном) состоянии.

§ 10.2 Задача о двух связанных каналах

В качестве простейшего примера многоканальной задачи рассеяния, на котором удобно познакомиться с новыми понятиями, не встречавшимися в задаче потенциального рассеяния, мы рассмотрим задачу о двух связанных каналах.

Пусть $|1\rangle = \Phi_1(\xi)$ — основное, а $|2\rangle = \Phi_2(\xi)$ — первое возбужденное состояние мишени A (рис. 10.1). Всеми оставшимися состояниями мишени пренебрежем, а уровни $\varepsilon_1 = 0$ и ε_2 будем считать невырожденными. Тогда полная волновая функция системы $x + A$, которая в общем случае имеет вид (10.2), есть суперпозиция только двух членов:

Рис. 10.1. Схема уровней мишени при рассмотрении двуканальной задачи.

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}) = u_1(\mathbf{r})\Phi_1(\xi) + u_2(\mathbf{r})\Phi_2(\xi) \ . \qquad (10.12)$$

При $E < \varepsilon_2$ возможно лишь упругое рассеяние и (говорят, что канал 2 в этом случае закрыт). Мы начнем с противоположного случая $E > \varepsilon_2$, когда возможно и упругое и неупругое рассеяния. Нас будут интересовать два общих вопроса: а) каким образом, не пользуясь теорией возмущений, рассчитать дифференциальное сечение неупругого рассеяния частиц; б) как влияет возможность неупругого рассеяния частицы на ее упругое рассеяние.

Ответ на эти вопросы мы получим, рассмотрев систему связанных уравнений (10.4) (или (10.8)) для канальных функций $\mathrm{u}_1(\mathbf{r})$ и $\mathrm{u}_2(\mathbf{r})$ с соответствующими асимптотическими условиями (10.7). В дифференциальной формулировке имеем:

$$\begin{cases} \left(\hat{h}_1 - E\right)\mathrm{u}_1(\mathbf{r}) = -V_{12}(\mathbf{r})\mathrm{u}_2(\mathbf{r})\,; \\ \left(\hat{h}_2 - E\right)\mathrm{u}_2(\mathbf{r}) = -V_{21}(\mathbf{r})\mathrm{u}_1(\mathbf{r})\,; \end{cases} \tag{10.13}$$

$$\begin{cases} \mathrm{u}_1(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} + \text{расходящаяся волна}\,, \\ \mathrm{u}_2(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \text{расходящаяся волна.} \end{cases} \tag{10.14}$$

Те же уравнения в интегральной формулировке имеют вид

$$\begin{cases} \mathrm{u}_1(\mathbf{r}) = \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) + \int G_1^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')V_{12}(\mathbf{r}')\mathrm{u}_2(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r'\,, \\ \mathrm{u}_2(\mathbf{r}) = \int G_2^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')V_{21}(\mathbf{r}')\mathrm{u}_1(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r'. \end{cases} \tag{10.15}$$

Используя введенное соотношением (6.2) выражение для гриновского оператора:

$$\hat{G}^{(+)}_{\mathrm{n}}(E) = \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}_{\mathrm{n}}}\quad, \tag{10.16}$$

будем также записывать систему (10.15) в более компактной форме:

$$\begin{aligned} \mathrm{u}_1 &= \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1} + \hat{G}_1^{(+)}(E)V_{12}\mathrm{u}_2\quad, \\ \mathrm{u}_2 &= \hat{G}_2^{(+)}(E)V_{21}\mathrm{u}_1\,. \end{aligned} \tag{10.17}$$

Приступим к решению системы связанных уравнений для функций $\mathrm{u}_1(\mathbf{r})$ и $\mathrm{u}_2(\mathbf{r})$. Сначала исключим из (10.13) и (10.17) функцию u_2:

$$\left(\hat{h}_1 - E\right)\mathrm{u}_1 = -V_{12}\hat{G}_2^{(+)}(E)V_{21}\mathrm{u}_1\quad; \tag{10.18}$$

$$\mathrm{u}_1 = \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1} + \hat{G}_1^{(+)}(E)V_{12}\hat{G}_2^{(+)}(E)V_{21}\mathrm{u}_1\,. \tag{10.19}$$

Вспомним, что $\hat{h}_1$ — это гамильтониан в одноканальной задаче рассеяния:

$$\hat{h}_1 = \hat{K} + V_{11}(\mathrm{r}) \quad , \tag{10.20}$$

где $V_{11}(\mathbf{r}) = \langle 1 | \hat{V}(\xi, \mathrm{r}) | 1 \rangle$ — потенциальная энергия взаимодействия частицы x с мишенью A, усредненная по основному состоянию мишени $|1\rangle$. Уравнению (10.18) можно придать вид уравнения Шредингера для задачи о движении частиц в поле потенциала:

$$\left(\hat{K} + \hat{V}^{\mathrm{eff}} - E\right)\mathrm{u}_1 = 0 \ , \tag{10.21}$$

если вместо среднего потенциала $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ ввести эффективный потенциал взаимодействия частицы с мишенью в упругом канале:

$$V_{11}(\mathbf{r}) \to \hat{V}^{\mathrm{eff}} = V_{11} + V_{12}\hat{G}_2^{(+)}(E)V_{21} \ . \tag{10.22}$$

Эффективный потенциал $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ обладает рядом свойств, существенно отличных от свойств среднего потенциала V_{11}. Во-первых, он всегда зависит от энергии налетающих частиц E. Во-вторых, оператор $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ — это нелокальный оператор; действуя им на произвольную функцию u в точке $\mathbf{r}$, мы затрагиваем значения этой функции во всей области изменения $\mathbf{r}$:

$$\hat{V}^{\mathrm{eff}}\,\mathrm{u}(\mathbf{r}) = V_{11}(\mathbf{r})\mathrm{u}(\mathbf{r}) + \\ + \int V_{12}(\mathbf{r})G_2^{(+)}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')V_{21}(\mathbf{r}')\,\mathrm{u}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r' \ . \tag{10.23}$$

В-третьих, $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ не является эрмитовым оператором:

$$\left(\hat{V}^{\mathrm{eff}}\right)^+ \neq \hat{V}^{\mathrm{eff}} \ . \tag{10.24}$$

Конечно, представление интегродифференциального однородного уравнения (10.18) в виде уравнения (10.21) для задачи потенциального рассеяния — это чисто формальный прием, который сам по себе не дает какого-

либо конкретного способа решить это сложное уравнение. Однако такое представление хорошо показывает, как влияет связь между упругим и неупругим каналами на характер упругого рассеяния, в частности, понятие эффективного потенциала является отправным для теоретического обоснования концепции оптического потенциала, который вводится в оптической модели разнообразных атомных и ядерных процессов (см. § 10.4).

§ 10.3. Вероятность упругого и неупругого рассеяния. S −матрица

Вернемся к общим уравнениям многоканальной теории рассеяния (10.8). Задача заключается в том, чтобы выразить измеряемые физические характеристики процесса столкновения — дифференциальные и полные сечения упругого и неупругого рассеяния — через канальные функции $\mathrm{u_n}(\mathbf{r})$, удовлетворяющие этим уравнениям. В § 8.1 мы решили эту задачу приближенно, использовав теорию возмущений. Сейчас не будем делать упрощений, свойственных теории возмущений, а получим для интересующих нас характеристик общие выражения. В частных случаях из них будут следовать формулы § 8.1, а также другие приближенные результаты (см. § 11.1 и 11.2).

Система уравнений (10.8) соответствует асимптотическим условиям (10.7). Вероятность упругого рассеяния определяется амплитудой расходящейся волны в асимптотике функции $\mathrm{u_1}(\mathbf{r})$, вероятности неупругого рассеяния — амплитудой расходящейся волны в асимптотике функций $\mathrm{u_n}(\mathbf{r})$, соответствующих другим неупругим каналам ($\mathrm{n} \neq 1,\ \varepsilon_\mathrm{n} < E$). Используя (10.11) и (10.10), найдем из системы уравнений (10.8) асимптотику функций $\mathrm{u_n(r)}$ в открытых каналах:

$$\mathrm{u_n}(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \delta_{\mathrm{n1}}\left(\mathrm{e}^{i\mathbf{k}_1\mathrm{r}} + f_1(\mathbf{k}_1', \mathbf{k}_1)\frac{\mathrm{e}^{ik_1 r}}{r}\right) -$$

$$-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik_n r}}{r}\sum_{m\neq n}\int \psi^{(-)*}_{n,\mathbf{k}'_n}(\mathbf{r}')\,V_{nm}(\mathbf{r}')\;u_m(\mathbf{r}')\,d^3r' \quad , \quad (10.25)$$

где $\mathbf{k}'_n = k'_n\mathbf{r}/r$ — вектор импульса рассеянной частицы в канале n. Отсюда для амплитуды упругого рассеяния получаем выражение

$$F_{elas}(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1) = f_1(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1) + \Delta F_{elas}(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1) \quad , \quad (10.26)$$

где первое слагаемое $f_1(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1)$ — это амплитуда потенциального рассеяния на потенциале $V_{11}(\mathbf{r})$, а второе слагаемое $\Delta F_{elas}(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1)$ — амплитуда упругого рассеяния, обусловленного связью между упругими и неупругими каналами:

$$\Delta F_{elas}(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1) = $$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\sum_{m\neq 1}\int \psi^{(-)*}_{1,\mathbf{k}'_1}(\mathbf{r})\,V_{1m}(\mathbf{r})\,u_m(\mathbf{r})d^3r \;. \quad (10.27)$$

Дифференциальное сечение упругого рассеяния дается выражением

$$\frac{d\sigma_{elas}}{d\Omega} = |f_1(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1) + \Delta F_{elas}(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}_1)|^2 \quad , \quad (10.28)$$

которое показывает, что вероятность упругого рассеяния не сводится к сумме вероятности рассеяния на среднем потенциале $V_{11}(\mathbf{r})$, и вероятности рассеяния за счет связи упругого и неупругих каналов; эти два механизма рассеяния интерферируют между собой.

Из (10.25) можно получить и амплитуду неупругого рассеяния:

$$F_n(\mathbf{k}'_n,\mathbf{k}_1) = $$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\sum_{m\neq n}\int \psi^{(-)*}_{n,\mathbf{k}'_n}(\mathbf{r})\,V_{nm}(\mathbf{r})\,u_m(\mathbf{r})d^3r \;. \quad (10.29)$$

Она определяет асимптотику функции $u_n(\mathbf{r})$ при $n \neq 1$, $\varepsilon_n < E$:

$$u_n(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = F_n(\mathbf{k}'_n, \mathbf{k}_1)\frac{e^{ik_n r}}{r} \quad . \qquad (10.30)$$

Отсюда легко найти и дифференциальное сечение неупругого рассеяния. Радиальная составляющая плотности тока рассеянных частиц в канале $n \neq 1$, согласно (10.30), равна

$$(j_{out})_{n\neq 1}|_{r\to\infty} = \frac{\hbar k_n}{\mu}\cdot\frac{|F_n(\mathbf{k}'_n, \mathbf{k}_1)|^2}{r^2} \quad ; \qquad (10.31)$$

в то же время при выбранной в (10.7) нормировке плоской волны плотность потока падающих частиц есть (как и в § 1.3) $j_{in} = \hbar k_1/\mu$. Таким образом, для дифференциального сечения неупругого рассеяния имеем

$$\frac{d\sigma_n}{d\Omega} = \frac{k_n}{k_1}|F_n(\mathbf{k}'_n, \mathbf{k}_1)|^2 \quad . \qquad (10.32)$$

Конечно, формулы (10.28), (10.27) и (10.32), (10.29) дают лишь формальное решение задачи, поскольку в (10.27) и (10.29) входят функции $u_n(\mathbf{r})$, которые еще предстоит, так или иначе, найти из системы уравнений (10.8) или (10.4) с дополнительным условием (10.7).

При небольших энергиях налетающих частиц уравнения метода сильной связи удобно решать с помощью разложения канальных волновых функций $u_n(r)$ по сферическим гармоникам (парциальным волнам). Основанием для такого приема является сохранение полного момента количества движения системы «частица—мишень». Если не учитывать спиновых взаимодействий и эффектов обмена, закон сохранения применим отдельно к полному орбитальному моменту системы. Рассмотрим как проводится разложение по парциальным волнам на примере классической задачи метода сильной связи — о рассеянии электронов атомом

водорода (подчеркнем, однако, что ввиду пренебрежения спиновыми и обменными эффектами, предлагаемое здесь рассмотрение носит схематический характер; см. продолжение в § 17.4).

Пусть поток электронов с заданным импульсом $\mathbf{k}_1$ падает на атом водорода, находящийся в основном состоянии $1s$. Орбитальный момент системы «электрон—атом» в начальном состоянии $\mathbf{L}$ определяется орбитальным моментом падающего электрона $\boldsymbol{\ell}$. В конечном состоянии полный орбитальный момент системы $\mathbf{L}'$ есть векторная сумма орбитальных моментов электрона $\boldsymbol{\ell}'$ и атома $\boldsymbol{\ell}_a$:

$$\mathbf{L} = \boldsymbol{\ell} \;\; ; \;\; \mathbf{L}' = \boldsymbol{\ell}' + \boldsymbol{\ell}_a$$

Перейдем в выражениях (10.3), (10.4), (10.7) и (10.8) от условного символа $|\mathrm{n}\rangle$ к конкретным квантовым числам (n_a, ℓ_a и m_a), характеризующим состояния атома водорода. В состоянии с заданными значениями полного орбитального момента системы L и его проекции на ось квантования M система «электрон — атом водорода» описывается волновой функцией

$$\Psi_{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathrm{n}_a, \ell_a, \ell} \left\{ \varphi_{\mathrm{n}_a \ell_a}(\mathbf{r}_1) \mathrm{u}_{\mathrm{n}_a \ell_a \ell}(\mathbf{r}_2) \right\}_{LM} \quad , \quad (10.33)$$

где мы закрепили индекс 1 за атомным, а индекс 2 за налетающим электронами, а фигурные скобки используем для обозначения векторного сложения моментов ℓ_a и ℓ:

$$\left\{ \varphi_{\mathrm{n}_a \ell_a}(\mathbf{r}_1) \mathrm{u}_{\mathrm{n}_a \ell_a \ell}(\mathbf{r}_2) \right\}_{LM} =$$

$$= \sum_{m_a, m} (\ell_a m_a \ell m | LM) \, \varphi_{\mathrm{n}_a \ell_a m_a}(\mathbf{r}_1) \mathrm{u}_{\mathrm{n}_a \ell_a, \ell m}(\mathbf{r}_2) \;\; ; (10.34)$$

здесь $(\ell_a m_a \ell m | LM)$ — это коэффициент Клебша—Гордона. Угловая часть канальных волновых функций $\mathrm{u}_{\mathrm{n}_a \ell_a, \ell m}(\mathbf{r})$ известна — это сферические функции $\mathrm{Y}_{\ell m}(\hat{\mathbf{n}})$:

$$u_{n_a\ell_a,\ell m}(\mathbf{r}) = R_{n_a\ell_a,\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\ . \qquad (10.35)$$

Подставляя (10.33) в уравнение Шредингера (10.1), получим систему уравнений типа (10.4) для радиальных функций $R_{n_a\ell_a,\ell}(r)$. Как и в задаче потенциального рассеяния, вместо функции $R_{n_a\ell_a,\ell}(r)$ более удобно использовать другие радиальные функции: $g_{n_a\ell_a,\ell}(r) = rR_{n_a\ell_a,\ell}(r)$. Для них система уравнений (10.4) имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + \varepsilon_{n_a} - \right.$$

$$\left. - E + V^{(L)}_{n_a\ell_a\ell,n_a\ell_a\ell}(r)\right) g_{n_a\ell_a,\ell}(r) =$$

$$= -\sum_{n'_a\ell'_a\ell'} V^{(L)}_{n_a\ell_a\ell,n'_a\ell'_a\ell'}(r) g_{n'_a\ell'_a,\ell}(r)\ , \quad (10.36)$$

где матричные элементы взаимодействия между электронами представляют собой интегралы по радиальной и угловой переменной r_1 атомного электрона, но лишь угловой переменной $\hat{n}_2$ налетающего электрона:

$$V^{(L)}_{n_a\ell_a\ell,n'_a\ell'_a\ell'}(r_2) =$$

$$= \sum_{m_a m,m'_a m'} (\ell_a m_a \ell m|LM)(\ell'_a m'_a \ell' m'|LM) \times \qquad (10.37)$$

$$\times \int \varphi^*_{n_a\ell_a m_a}(\mathbf{r}_1) Y^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{n}}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_{n'_a\ell'_a m'_a}(\mathbf{r}_1) Y_{\ell' m'}(\hat{\mathbf{n}}_2) r_1^2 dr_1\, d\Omega_1 d\Omega_2$$

т.е. зависит от радиальной координаты r_2 налетающего электрона (вид оператора e^2/r_{12} не зависит от выбора оси квантования, поэтому матричный элемент (10.37) не содержит магнитного числа M).

Дополнительные асимптотические условия для функций $g_{n_a \ell_a, \ell}(r)$ при $r \to \infty$ легко получить непосредственно из (10.7):

$$g_n^{(n')}(r)\Big|_{r\to\infty} \sim \delta_{nn'} e^{-i(k_n r - \ell\pi/2)} - S_{nn'} e^{i(k_n r - \ell\pi/2)} , \quad (10.38)$$

где индекс $n \equiv (n_a \ell_a \ell)$ характеризует номер канала, а индекс $n' \equiv (n'_a \ell'_a \ell')$ — номер решения. Решения системы (10.36) с дополнительным условием (10.38) определяют S −матрицу процесса столкновения, а вместе с ней и вероятность упругого и неупругого рассеяний.

Главная проблема метода сильной связи — это проблема сходимости. Формально речь идет о двух разных вопросах — сходимости разложения (10.3) или (10.33) по каналам рассеяния и сходимости разложения по парциальным волнам. В действительности, благодаря тому, что уравнения метода сильной связи практически всегда решаются численно, эти два вопроса тесно переплетены между собой. На практике и оптимальное число каналов, и оптимальное число парциальных волн определяются прямым подбором — так, чтобы при заданной энергии налетающих частиц окончательный физический результат был устойчив к их вариациям.

§ 10.4. Понятие обобщенного оптического потенциала. Оптическая модель упругого рассеяния

Обобщим понятие эффективного потенциала, который мы ввели в рамках задачи о двух каналах, на случай произвольного числа связанных каналов и введем, следуя Фешбаху (H.Feshbach, 1958), понятие обобщенного оптического потенциала. Для этого выделим в системе уравнений (10.4) функцию упругого канала $u_1(r)$, а из остальных функций составим столбец:

$$\mathbf{\Phi} \equiv \begin{pmatrix} \mathrm{u}_2(\mathbf{r}) \\ \mathrm{u}_3(\mathbf{r}) \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} \quad . \tag{10.39}$$

Введем также матрицу операторов $\hat{h}$ с элементам

$$\langle \mathrm{n}|\hat{h}|\mathrm{m}\rangle = \hat{h}_{\mathrm{n}}\delta_{\mathrm{nm}} + V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r}), \;\; \mathrm{n} = 2,3,\cdots \;\; , \tag{10.40}$$

а также строку и столбец операторов

$$\hat{V} = (V_{12}(\mathbf{r}), V_{13}(\mathbf{r}), \cdots) \;\; , \tag{10.41}$$

$$\hat{V}^{+} = \begin{pmatrix} V_{21}(\mathbf{r}) \\ V_{31}(\mathbf{r}) \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} \;\; , \tag{10.42}$$

которые связывают волновую функцию частицы в упругом канале $\mathrm{u}_1(\mathbf{r})$ со столбцом волновых функций $\mathbf{\Phi}$ в неупругих каналах. Тогда систему уравнений (10.4) можно записать в виде двух связанных уравнений, подобно системе уравнений (10.13):

$$\begin{aligned} &\left(\hat{h}_1 - E\right)\mathrm{u}_1 = -\hat{V}\mathbf{\Phi} \,, \\ &\left(\hat{h} - E\right)\mathbf{\Phi} = -\hat{V}^{+}\mathrm{u}_1 \,. \end{aligned} \tag{10.43}$$

Формальное решение второго уравнения получается обращением матрицы операторов $\left(\hat{h} - E\right)$:

$$\mathbf{\Phi} = \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}}\hat{V}^{+}\mathrm{u}_1 \quad . \tag{10.44}$$

Подставляя это формальное решение в первое уравнение (10.43), получим однородное интегродифференциальное уравнение для $\mathrm{u}_1(\mathbf{r})$, подобное уравнению (10.18):

$$\left(\hat{h}_1 - E\right)\mathrm{u}_1 = -\hat{V}\frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}}\hat{V}^{+}\mathrm{u}_1 \;\; . \tag{10.45}$$

Запишем его также в более явной форме:

$$\left(\hat{h}_1 - E\right)\mathrm{u}_1 = -\sum_{\mathrm{n},\mathrm{n}'\neq 1} V_{1\mathrm{n}} \langle \mathrm{n}| \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}} |\mathrm{n}'\rangle V_{\mathrm{n}'1}\mathrm{u}_1 \quad ; \quad (10.46)$$

здесь каждый элемент матрицы

$$\langle \mathrm{n}| \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}} |\mathrm{n}'\rangle$$

есть нелокальный оператор.

Уравнению (10.45) можно придать форму уравнения Шредингера (10.21) для одноканальной задачи рассеяния, если ввести нелокальный оператор $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ по формуле

$$\hat{V}^{\mathrm{eff}} = V_{11} + \hat{V} \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}} \hat{V}^{+} =$$

$$= V_{11} + \sum_{\mathrm{n},\mathrm{n}'\neq 1} V_{1\mathrm{n}} \langle \mathrm{n}| \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}} |\mathrm{n}'\rangle V_{\mathrm{n}'1} \quad . \quad (10.47)$$

В частном случае задачи о двух связанных каналах выражение (10.47) переходит в (10.22). Оператор $\hat{V}^{\mathrm{eff}}$ в многоканальной задаче рассеяния называется **обобщенным оптическим потенциалом**. Как и оператор (10.22), он нелокален, неэрмитов, явно зависит от энергии частицы.

В оптической модели, которая широко используется и в ядерной и в атомной физике, нелокальный оператор взаимодействия частицы с мишенью заменяется обычно локальным оператором — **оптическим потенциалом** взаимодействия:

$$V_{\mathrm{opt}}(\mathbf{r}) = V_0(\mathbf{r}) + iW(\mathbf{r}) \quad . \qquad (10.48)$$

Чтобы раскрыть физический смысл мнимой части оптического потенциала, подставим (10.48) в одночастичное нестационарное уравнение Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2\boldsymbol{\nabla}^2}{2\mu}+V_0(\mathbf{r})+iW(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r},t)\,, \qquad (10.49)$$

а затем получим из него обобщенное, учитывающее неэрмитовость оператора $V_{\text{opt}}(\mathbf{r})$, уравнение непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(\mathbf{r},t)|^2=-\text{div}\,\mathbf{j}(\mathbf{r},t)+\frac{2W}{\hbar}|\psi(\mathbf{r},t)|^2 \quad ; \quad (10.50)$$

здесь плотность тока вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ дается обычным выражением (1.37). Что касается слагаемого, пропорционального мнимой части оптического потенциала, то при $W>0$ оно соответствует генерации частиц, а при $W<0$ — поглощению частиц. Если поглощательную способность вещества мишени характеризовать в каждой точке коэффициентом поглощения $\varkappa(\mathbf{r})$, то, согласно (10.50), этот коэффициент поглощения дается формулой

$$\varkappa(\mathbf{r})=2|W|/\hbar \quad . \qquad (10.51)$$

В нерелятивистской теории мы не рассматриваем процессов аннигиляции частиц и их превращений друг в друга, к которым можно было бы отнести термин «поглощение» в буквальном смысле. В чем же тогда заключается истинный физический смысл коэффициента поглощения, вводимого в рамках оптической модели? Ответ на этот вопрос надо искать в общих, строгих выражениях многоканальной теории столкновений и, в частности, в формуле (10.47) для обобщенного оптического потенциала. Введя оператор взаимодействия $\hat{V}^{\text{eff}}$, мы свели многоканальную задачу упругого рассеяния частиц на сложной мишени к одноканальной потенциальной задаче. Неэрмитовость этого оператора является как бы «платой» за формальное исключение из рассмотрения всех неупругих каналов. Отсюда ясно, что «поглощение» частиц при их взаимодействии со сложной

мишенью, которое в оптической модели описывается мнимой частью одночастичного потенциала, есть с неформальной точки зрения выбывание частиц из упругого канала в неупругий. Чтобы глубже проникнуть в существо этого вопроса и по возможности не заслонять принципиальную сторону дела разными деталями и громоздкими выкладками, рассмотрим его на примере двухканальной задачи.

В этом случае обобщенный оптический потенциал (10.47) дается более простым выражением (10.22). Заменим входящую в него функцию Грина $\hat{G}_2^{(+)}(E)$, описывающую движение частицы в канале 2, ее спектральным разложением:

$$\hat{G}_2^{(+)}(E) = \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}_2} = \\ = \sum_{\nu} \frac{|\Phi_\nu\rangle\langle\Phi_\nu|}{E - E_\nu} + \int \frac{|\varphi(E')\rangle\langle\varphi(E')|}{E^{(+)} - E'} \mathrm{d}E' \quad ; \qquad (10.52)$$

здесь первое слагаемое охватывает все дискретные уровни частицы в канале 2 (на рис. 10.1 они расположены в области $E > \varepsilon_2$); второе слагаемое есть интеграл по непрерывному спектру в этом канале. Роль первого слагаемого мы исследуем в следующей лекции (там мы увидим, что связанные состояния в канале 2 проявляются как резонансы упругого рассеяния в канале 1). Сейчас ограничимся лишь интегральным членом и рассмотрим связанные с ним свойства обобщенного оптического потенциала в двух ситуациях: если $E > \varepsilon_2$ (канал 2 открыт) и если $E < \varepsilon_2$ (канал 2 закрыт).

В первом случае полюс подинтегрального выражения $\varepsilon' = E$ лежит на пути интегрирования, и его обход по правилу, указываемому знаком $E^{(+)}$, приводит к разбиению интеграла на действительную и мнимую части:

$$\int \frac{|\varphi(E')\rangle\langle\varphi(E')|}{E^{(+)} - E'}\,\mathrm{d}E' =$$

$$= \mathcal{P}\int \frac{|\varphi(E')\rangle\langle\varphi(E')|}{E - E'}\,\mathrm{d}E' - i\pi|\varphi(E)\rangle\langle\varphi(E)| \quad . \quad (10.53)$$

Подставляя (10.53) в (10.22), а затем в одноканальное уравнение (10.21), отметим, что при $E > \varepsilon_2$ мнимая часть обобщенного оптического потенциала содержит матричные элементы оператора межканального взаимодействия V_{12}, соответствующие одному и тому же значению полной энергии системы в канале 1 и в канале 2 $(\varepsilon = E)$. Таким образом, когда канал 2 открыт, неэрмитовость оптического потенциала связана с реально происходящим неупругим рассеянием частиц.

При $E < \varepsilon_2$ полюс подынтегрального выражения в (10.52) остается в стороне от области интегрирования, и знак $E^{(+)}$ в интеграле не нужен:

$$\hat{G}_2^{(+)}(E) = \frac{1}{E - \hat{h}_2} \quad . \quad (10.54)$$

В этом случае обобщенный оптический потенциал является эрмитовым, а следовательно, модельный потенциал в оптической модели, должен быть вещественным. В действительности, однако, в ядерной физике комплексный оптический потенциал (например, оптический потенциал взаимодействия протонов с ядрами) применяется и при таких энергиях частиц, когда все неупругие каналы еще закрыты. Это связано с особым характером измерений рассеяния в условиях большой плотности резонансов.

Итак, из строгих уравнений многоканальной задачи рассеяния видно, что, по мере того как с ростом энергии частиц открывается каждый неупругий канал, растет мнимая часть оптического потенциала. Согласно формуле (10.47), в первом приближении вклады отдельных

неупругих каналов в оптический потенциал аддитивны. Этот вывод находится в соответствии с тем, что дает феноменологическая оптическая модель для ядерных реакций и электрон-атомных столкновений.

Упражнения

10.1. Показать, что система интегральных уравнений (10.8) эквивалентна системе дифференциальных уравнений (10.4) и асимптотическому условию (10.7).

10.2. Вывести обобщенное уравнение непрерывности (10.50), для частицы, движущейся в оптическом потенциале (10.48).

10.3. Согласно модели оболочек, основному состоянию $^3S_{1^+}$ ядра ^{6}Li и его первому возбужденному состоянию $^3D_{3^+}$ соответствует конфигурация $(1s)^4(1p)^2$. Считая одночастичные волновые функции нуклонов осцилляторными, найти зарядовую переходную плотность $\rho_{tr}(\mathbf{r})$ для указанной пары состояний ядра ^{6}Li. Сравнить форму радиальной зависимости переходной плотности $\rho_{tr}(\mathbf{r})$ с формой распределения заряда в основном состоянии рассматриваемого ядра.

10.4. В условиях предыдущего упражнения получить систему уравнений метода сильной связи для упругого и неупругого рассеяний нейтронов ядром ^{6}Li. Учесть каналы, соответствующие основному и первому возбужденному состоянию ядра. Нуклон-нуклонное взаимодействие аппроксимировать $\delta-$потенциалом: $v(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = g\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Спиновыми и обменными эффектами пренебречь.

10.5. Рассматривая взаимодействие частицы с мишенью по теории возмущений, получить формулы борновского приближения (8.22), (8.23) как частный случай общих формул (10.29) и (10.32).

Лекция 11. Оптический потенциал в теории неупругого рассеяния. Метод искаженных волн

§ 11.1. Приближение искаженных волн

В данном параграфе, отправляясь от общих уравнений многоканальной теории столкновений, мы сформулируем основные положения метода искаженных волн — одного из известных приближенных методов теории неупругих процессов в ядерной и атомной физике. Обратимся сначала к уравнениям двухканальной задачи рассеяния, чтобы решить вопрос, поставленный еще в § 10.2: как, не пользуясь теорией возмущений, рассчитать дифференциальное сечение неупругого рассеяния частиц? Рассматривая в § 10.2 упругое рассеяние частиц, мы исключили из системы связанных уравнений (10.17) канальную функцию неупругого канала u_2. Теперь нас интересует как раз эта функция — точнее, ее асимптотика при больших r. Поэтому исключим из системы уравнений (10.17) канальную функцию u_1:

$$\mathrm{u}_2 = \hat{G}_2^{(+)}(E)V_{21}\left\{\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} + \hat{G}_1^{(+)}V_{12}\mathrm{u}_2\right\} \quad . \qquad (11.1)$$

Как и (10.19), это соотношение дает лишь формальное решение задачи; по существу, формула (11.1) — это интегральное уравнение для функции $\mathrm{u}_2(\mathbf{r})$, способ решения которого следует обсуждать особо. Одним из них может быть способ итераций:

$$\mathrm{u}_2 \approx \hat{G}_2^{(+)}(E)V_{21}\left\{\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} + \hat{G}_1^{(+)}V_{12}\hat{G}_2^{(+)}V_{21}\psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)} + \cdots\right\}. \qquad (11.2)$$

Очевидно, итерационный ряд (11.2) сходится тем лучше, чем слабее взаимодействие V_{21}, связывающее упругий и неупругий каналы. Важно, однако, подчеркнуть, что полученная таким способом канальная функция u_2, удовлетворяет требуемому асимптотическому условию (10.14) независимо от того, с какой точностью вычисляется ряд, стоящий в фигурных скобках соотношения (11.2). Это

обеспечивается асимптотическим поведением функции Грина $\hat{G}_2^{(+)}(E)$. Подставляя (10.10) в (11.2) мы видим, что при $r \to \infty$ канальная функция $\mathrm{u}_2(\mathbf{r})$ имеет вид расходящейся волны:

$$\mathrm{u}_2(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)\frac{\mathrm{e}^{ik_2 r}}{r} \quad , \qquad (11.3)$$

где $\mathbf{k}_2$ — импульс рассеянной частицы в канале 2. Функция $F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)$ — амплитуда неупругого рассеяния, точное вычисление которой требует точного решения уравнения (11.1):

$$F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \psi_{2,\mathbf{k}_2}^{(-)}(\mathbf{r}) V_{21} \times \\ \times \left\{\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} + \hat{G}_1^{(+)} V_{12}\mathrm{u}_2\right\}\mathrm{d}^3 r \quad . \qquad (11.4)$$

Если нормировка искаженных волн $\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\psi_{2,\mathbf{k}_2}^{(-)}(\mathbf{r})$, входящих в (11.4), выбрана в соответствии с (10.11):

$$\begin{aligned} \psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} &= \mathrm{e}^{i\mathbf{k_1 r}} + \text{ расходящаяся волна,} \\ \psi_{2,\mathbf{k}_2}^{(-)} &= \mathrm{e}^{i\mathbf{k_2 r}} + \quad \text{сходящаяся волна,} \end{aligned} \qquad (11.5)$$

то дифференциальное сечение неупругого рассеяния выражается через амплитуду (11.4) по общей формуле (10.32):

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_2}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{k_2}{k_1}|F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)|^2 \quad . \qquad (11.6)$$

До сих пор, кроме исходного ограничения двумя связанными каналами, мы не сделали никаких дополнительных приближений; соотношения (11.6) и (11.4) в рамках поставленной двухканальной задачи являются точными. **Приближение искаженных волн** для неупругого рассеяния состоит в том, что при вычислении амплитуды (11.4) точная канальная функция $\mathrm{u}_1 =$

$= \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1} + \hat{G}^{(+)}_1 V_{12} u_2$ заменяется волновой функцией $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$:

$$F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \psi^{(-)*}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}) V_{21}\, \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3 r \ . \quad (11.7)$$

Таким образом, приближение искаженных волн — это теория возмущений по взаимодействию между каналами. Отличие формулы (11.7) от выведенной ранее методами теории возмущений формулы (8.23) в том, что сейчас мы в качестве волновых функций начального и конечного состояний берем не плоские волны, а искажённые волны $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$ и $\psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})$; согласно (10.11), они строятся с учётом диагональной части взаимодействия между частицей и мишенью:

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{11}(\mathbf{r}) - E\right] \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) = 0 \ , \\ &\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{22}(\mathbf{r}) + \varepsilon_2 - E\right] \psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}) = 0 \ . \end{aligned} \quad (11.8)$$

Итак, в приближении искаженных волн дифференциальное сечение неупругого рассеяния вычисляется по формуле

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_2}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{k_2}{k_1} \times$$

$$\times \left| \iint \psi^{(-)*}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})\, \Phi^*_2(\xi)\, \hat{V}(\xi, \mathbf{r})\, \Phi_1(\xi)\, \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}^3 r \right|^2 , \quad (11.9)$$

где $\Phi_1(\xi)$ и $\Phi_2(\xi)$ — волновые функции начального и конечного состояний мишени. В частном случае, если пренебречь взаимодействием частицы с мишенью в начальном и конечном состояниях, т.е. произвести замену $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1} \to \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}$, $\psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2} \to \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_2\mathbf{r}}$, мы получим из (11.9) формулы борновского приближения (8.22), (8.23).

Кажется, что и саму формулу (11.9) тоже легко получить методом, изложенным в § 8.1, если взять в качестве исходных волновых функций начального и конечного состояний частицы не плоские, а искаженные волны. Не ясно, правда, чем бы диктовался при этом выбор функций $\psi^{(+)}$ и $\psi^{(-)}$. Отправляясь от общей формулировки многоканальной задачи рассеяния, мы «автоматически», одновременно с выводом самих формул (11.7), (11.9), решили вопрос о выборе искаженных волн $\psi^{(+)}$ в качестве волновых функций начального состояния и искаженных волн $\psi^{(-)}$ — конечного состояния. Полученный результат относится не только к теории неупругого рассеяния, он справедлив и в других приложениях метода искаженных волн. Итак, запомним — для описания падающих частиц следует использовать искажённую волну $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ (на бесконечности это «плоская плюс расходящаяся волны»), для описания вылетающих частиц — искаженную волну $\psi^{(-)}(\mathbf{r})$ (на бесконечности «плоская плюс сходящаяся волна»).

§ 11.2. Метод искаженных волн и оптическая модель

В предыдущем параграфе мы получили основные формулы метода искаженных волн, отвлекаясь от связи входного и выходного каналов с другими каналами. Устраним этот недостаток. Забегая вперед, отметим, что уточнение полученных выше формул (11.7), (11.9) коснется искаженных волн $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$ и $\psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})$. Физические соображения подсказывают, в частности, что вместо этих функций, которые вычисляются с учетом среднего взаимодействия между частицей и мишенью, более оправданным было бы взять искаженные волны, рассчитанные для соответствующих комплексных оптических потенциалов во входном и выходном каналах. Это значит, что вместо уравнений (11.8) следует решать уравнения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{\text{opt},1}(\mathbf{r}) - E\right]\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) = 0\ ,$$
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{\text{opt},2}(\mathbf{r}) + \varepsilon_2 - E\right]\psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}) = 0\ . \qquad (11.10)$$

Входящие сюда оптические потенциалы $V_{\text{opt},1}$ и $V_{\text{opt},2}$ вообще говоря, различаются между собой и по амплитуде и по форме как вещественной, так и мнимой части. На практике при использовании метода искаженных волн для описания неупругого рассеяния параметры оптического потенциала во входном упругом канале чаще всего определяются путем подгонки под данные об упругом рассеянии. Что касается оптического потенциала в неупругом канале, то здесь подобная подгонка, разумеется, невозможна, и поэтому в качестве $V_{\text{opt},2}(\mathbf{r})$ обычно используется тот же потенциал $V_{\text{opt},1}(\mathbf{r})$. Разберем, отправляясь от общих уравнений многоканальной теории рассеяния, насколько обоснована вся эта процедура.

Пусть нам надо вычислить дифференциальное сечение процесса $A(x,x')A^*$ с переходом мишени из основного $|1\rangle$ в некоторое возбужденное состояние $|2\rangle$. Обращаясь к приему, использованному в § 10.4, выделим в исходной системе уравнений (10.4) канальные функции входного $\mathrm{u}_1(\mathbf{r})$ и выходного $\mathrm{u}_2(\mathbf{r})$ каналов, а из остальных функций составим столбец:

$$\widetilde{\mathbf{\Phi}} \equiv \begin{pmatrix} \mathrm{u}_3(\mathbf{r}) \\ \mathrm{u}_4(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad . \qquad (11.11)$$

Введем также матрицу операторов $\hat{\tilde{\mathrm{h}}}$ с теми же элементами $\langle \mathrm{n}|\hat{\mathrm{h}}|\mathrm{m}\rangle$, что даются формулой (10.40), но с укороченным по сравнению с (10.40) базисом — в него не входят каналы 1 и 2. По аналогии с (10.41) и (10.42) введем также

операторы, связывающие каждый из каналов 1 и 2 со всеми остальными каналами:

$$\hat{V}_1 = (V_{13}(\mathbf{r}), V_{14}(\mathbf{r}), \cdots) \ , \qquad \hat{V}_1^+ \equiv \begin{pmatrix} V_{31}(\mathbf{r}) \\ V_{41}(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} \ ; \tag{11.12}$$

$$\hat{V}_2 = (V_{23}(\mathbf{r}), V_{24}(\mathbf{r}), \cdots) \ , \qquad \hat{V}_2^+ \equiv \begin{pmatrix} V_{32}(\mathbf{r}) \\ V_{42}(\mathbf{r}) \\ \vdots \end{pmatrix} \ . \tag{11.13}$$

Тогда систему уравнений (10.4) можно представить в виде

$$\begin{aligned} &\left(\hat{h}_1 - E\right)\mathrm{u}_1 = -\hat{V}_1\widetilde{\mathbf{\Phi}} - V_{12}\mathrm{u}_2; \\ &\left(\hat{h}_2 - E\right)\mathrm{u}_2 = -\hat{V}_2\widetilde{\mathbf{\Phi}} - V_{21}\mathrm{u}_1; \\ &\left(\hat{\tilde{\mathrm{h}}} - E\right)\widetilde{\mathbf{\Phi}} = -\hat{V}_1^+\mathrm{u}_1 - \hat{V}_2^+\mathrm{u}_2 \, . \end{aligned} \tag{11.14}$$

Приступая к решению этой системы, сначала исключим из нее столбец $\widetilde{\mathbf{\Phi}}$:

$$\begin{aligned} &\left(\hat{h}_1 + \hat{V}_1\frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}}\hat{V}_1^+ - E\right)\mathrm{u}_1 = \\ &\qquad = -\left\{\hat{V}_1\frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}}\hat{V}_2^+ + V_{12}\right\}\mathrm{u}_2; \\ &\left(\hat{h}_2 + \hat{V}_2\frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}}\hat{V}_2^+ - E\right)\mathrm{u}_2 = \\ &\qquad = -\left\{\hat{V}_2\frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}}\hat{V}_1^+ + V_{21}\right\}\mathrm{u}_1 \ . \end{aligned} \tag{11.15}$$

Полученную систему уравнений надо решать с асимптотическим условием (10.14).

Будем искать приближенное решение этой системы, соответствующее низшему порядку теории возмущений по

взаимодействию, связывающему входной и выходной каналы. Отметим принципиальную разницу между уравнениями (11.15) и системой уравнений (10.13) в схематической двухканальной задаче: в многоканальном случае связь каналов 1 и 2 осуществляется не только прямо – благодаря оператору $V_{12} = V_{21}^*$, но и косвенно, через все другие каналы - благодаря нелокальному оператору, стоящему в правой части уравнений (11.15). Выпишем его в более явной форме, используя (11.12) и 11.13):

$$\hat{V}_1 \frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}} \hat{V}_2^+ = \sum_{\mathrm{n},\mathrm{n}' \neq 1,2} V_{1\mathrm{n}} \langle \mathrm{n}| \frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}} |\mathrm{n}'\rangle V_{\mathrm{n}'2} \quad . \quad (11.16)$$

Оператор (11.16) пропорционален произведению недиагональных матричных элементов $V_{1\mathrm{n}}$ и $V_{\mathrm{n}'2}$, т.е. представляет собой член более высокого порядка относительно межканального взаимодействия, чем V_{12}.В низшем порядке теории возмущений по межканальному взаимодействию оператор (11.16) следовало бы из уравнений (11.15) исключить. Так мы, действительно, и поступим, однако прежде разберем, не следует ли одновременно исключить из уравнений (11.15) также нелокальные операторы $\hat{V}_1 \left(E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}\right)^{-1} \hat{V}_1^+$ и $\hat{V}_2 \left(E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}\right)^{-1} \hat{V}_2^+$, поскольку они тоже пропорциональны произведению недиагональных матричных элементов $V_{1\mathrm{n}}$ и $V_{\mathrm{n}'2}$, например:

$$\hat{V}_1 \frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}} \hat{V}_1^+ = \sum_{\mathrm{n},\mathrm{n}' \neq 1,2} V_{1\mathrm{n}} \langle \mathrm{n}| \frac{1}{E^{(+)} - \hat{\tilde{h}}} |\mathrm{n}'\rangle V_{\mathrm{n}'1} \quad . \quad (11.17)$$

Но тогда вообще пропадет связь каналов 1 и 2 со всеми другими каналами, и задача сведется к двухканальной. Как же сохранить (хотя бы приближенно) основные эффекты, обусловленные связью входного и выходного каналов со всеми другими каналами?

Внимательное рассмотрение показывает, что для отбрасывания недиагонального оператора $\hat{V}_1(E^{(+)} - \hat{\hat{h}})^{-1}\hat{V}_2^+$ имеется больше оснований, чем для отбрасывания диагональных операторов $\hat{V}_1\left(E^{(+)} - \hat{\hat{h}}\right)^{-1}\hat{V}_1^+$ или $\hat{V}_2\left(E^{(+)} - \hat{\hat{h}}\right)^{-1}\hat{V}_2^+$. Действительно, допустим, что матрица оператора $\hat{\hat{h}}$ диагональна в пространстве каналов $|\mathrm{n}\rangle$. Тогда двойное суммирование по n и n' в (11.16) и (11.17) переходит в однократное. При этом в диагональном операторе (11.17) фаза (знак) каждого матричного элемента $V_{1\mathrm{n}}$ компенсируется фазой (знаком) входящего с ним в одно произведение матричного элемента $V_{\mathrm{n}1} = V_{1\mathrm{n}}^*$. Наоборот, в недиагональном операторе (11.16) матричные элементы $V_{1\mathrm{n}}$ и $V_{\mathrm{n}2}$, соответствующие каждому отдельному n, могут иметь как совпадающие, так и противоположные знаки. Учитывая, что сумма (11.16) фактически включает бесконечное число членов, допустим, что относительные знаки (фазы) отдельных слагаемых меняются хаотически, так что вклады разных каналов в оператор (11.16) полностью погашают друг друга. Назовем это приближение **приближением хаотических фаз**.

Итак, в приближении хаотических фаз мы пренебрегаем косвенной связью входного и выходного каналов через другие каналы по сравнению с их прямой связью. Тогда система уравнений (11.15) принимает вид

$$\left(\hat{h}_1 + \hat{V}_1\frac{1}{E^{(+)} - \hat{\hat{h}}}\hat{V}_1^+ - E\right)\mathrm{u}_1 = -V_{12}\mathrm{u}_2 \quad ,$$

$$\left(\hat{h}_2 + \hat{V}_2\frac{1}{E^{(+)} - \hat{\hat{h}}}\hat{V}_2^+ - E\right)\mathrm{u}_2 = -V_{21}\mathrm{u}_1 \quad . \qquad (11.18)$$

Если теперь сделать замену

$$V_{11} + \hat{V}_1 \frac{1}{E^{(+)} - \hat{\hat{h}}} \hat{V}_1^+ \to V_{\text{opt},1}(\mathbf{r}) \quad ,$$

$$V_{22} + \hat{V}_2 \frac{1}{E^{(+)} - \hat{\hat{h}}} \hat{V}_2^+ \to V_{\text{opt},2}(\mathbf{r}) \quad , \qquad (11.19)$$

то мы приходим к задаче о двух каналах, однако, в отличие от задачи, рассмотренной в § 10.2, в каждом из каналов 1 и 2 частица взаимодействует с мишенью как с комплексным оптическим потенциалом:

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2 + V_{\text{opt},1}(\mathbf{r}) - E\right] \mathrm{u}_1(\mathbf{r}) = -V_{12}\mathrm{u}_2 \ , \\ &\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2 + V_{\text{opt},2}(\mathbf{r}) + \varepsilon_2 - E\right] \mathrm{u}_2(\mathbf{r}) = -V_{21}\mathrm{u}_1 \ . \end{aligned} \qquad (11.20)$$

В предыдущем параграфе было показано, что в приближении искаженных волн решение двухканальной задачи дается формулами (11.7), (11.9). Теперь, в отличие от (11.8), мы должны подставить в эти формулы искаженные волны падающей и рассеянной частиц, удовлетворяющие одночастичному уравнению Шредингера (11.10) с оптическим потенциалом. Обсудим условия, позволяющие сделать замену (11.19). Прежде всего, сравнивая (11.17) и (10.47), легко заметить, что нелокальный оператор $V_{11} + \hat{V}_1 \left(E^{(+)} - \hat{\hat{h}}\right)^{-1} \hat{V}_1^+$ — не совсем то же самое, что обобщенный оптический потенциал $\hat{\mathrm{V}}^{\mathrm{eff}}$, определяющий упругое рассеяние во входном канале 1 и аппроксимируемый модельным оптическим потенциалом (10.48); они совпадают между собой лишь с точностью до вклада в оптический потенциал выходного канала 2. Соответствующее различие существует также между оптическим потенциалом $V_{\text{opt},1}(\mathbf{r})$, входящим в (11.20), и оптическим потенциалом (10.48), используемым в задаче упругого рассеяния. Правда, сама аппроксимация

сложного, зависящего от энергии, нелокального обобщенного оптического потенциала с помощью простого локального оператора (10.48) предполагает, что в сумме (10.47) нет резко выделенных членов, обусловленных особенно сильной связью основного состояния мишени с каким-либо отдельным возбужденным состоянием. Поэтому, коль скоро такая аппроксимация принята, не следует придавать большого значения формальному различию между потенциалом $V_{\mathrm{opt},1}(\mathbf{r})$ и оптическим потенциалом (10.48).

Продолжая обсуждение замены (11.19), обратим внимание на различие между средними потенциалами $V_{11}(\mathbf{r}) = \langle 1|\hat{V}(\xi, \mathbf{r})|1\rangle$ и $V_{22}(\mathbf{r}) = \langle 2|\hat{V}(\xi, \mathbf{r})|2\rangle$, относящимися к основному и возбужденному состояниям мишени. Как правило, размеры атома или атомного ядра в возбуждённом состоянии больше, чем в основном состоянии. Значит, и средний потенциал $V_{22}(\mathbf{r})$ имеет более протяженный характер, чем средний потенциал $V_{11}(\mathbf{r})$ (см. упр. 11.1).

В заключение параграфа заметим, что, конечно, систему уравнений (11.20) можно использовать не только в качестве промежуточного этапа при выводе формул метода искаженных волн, но и непосредственно — в рамках задачи на связь двух каналов с оптическими потенциалами в каждом из этих каналов.

§ 11.3. Метод искаженных волн при высоких энергиях

Прямой способ вычисления интеграла (11.7) для получения амплитуды неупругого рассеяния заключается в том, что обе искаженные волны $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$ и $\psi^{(-)}_{1,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})$ подставляются в (11.7) в виде разложения по сферическим гармоникам, после чего интегрирование по углам выполняется аналитически, и дело сводится к численному интегрированию по радиальной переменной. Однако с ростом энергии налетающих частиц число орбитальных моментов

в падающей и рассеянной волнах быстро растет, поэтому при больших энергиях такая процедура расчетов по методу искаженных волн становится очень громоздкой, а точность расчетов — плохо контролируемой. В этом случае оказывается полезной другая процедура; в ее основе лежит использование эйконального приближения для решения уравнений (11.10).

Заметим, что ввиду ограниченных размеров мишени интегрирование в (11.7) производится фактически по некоторой конечной области — примерно той же, в которой сосредоточены оптические потенциалы $V_{\mathrm{opt},1}(\mathbf{r})$ и $V_{\mathrm{opt},2}(\mathbf{r})$. В § 4.2 было показано, что при больших энергиях частицы решение одночастичного уравнения Шредингера $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ во внутренней области можно с хорошей точностью представить в виде интеграла по прямому лучу, из бесконечности в точку $\mathbf{r}$ по направлению импульса падающей частицы:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \exp\left[i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{i\mu}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} V(\mathbf{b} + \hat{\mathbf{k}}z')\mathrm{d}z'\right] \quad , \qquad (11.21)$$

где $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор в направлении вектора $\mathbf{k}$. То же соотношение удобно записать по другому:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \exp\left[i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{i\mu}{\hbar^2 k}\int_{0}^{\infty} V(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{k}}s)\mathrm{d}s\right] \quad , \qquad (11.22)$$

Воспользуемся этим результатом для приближенного решения уравнений (11.10). При этом нам понадобится также соотношение (1.43), связывающее между собой искаженные волны двух типов; имея в виду использовать его для вычисления интеграла (11.7), запишем это соотношение в виде

$$\left[\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})\right]^* = \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad . \qquad (11.23)$$

Отсюда для частицы, движущейся в потенциале $V(\mathbf{r})$, имеем

$$\left[\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})\right]^* = \exp\left[-i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{i\mu}{\hbar^2 k}\int_0^\infty V(\mathbf{r}+\hat{\mathbf{k}}s)\mathrm{d}s\right] \quad , \quad (11.24)$$

здесь интеграл берется по лучу, идущему из точки $\mathbf{r}$ в бесконечность по направлению импульса рассеянной частицы. Подставляя (11.22) и (11.24) в (11.7), получаем

$$F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} S(\mathbf{r}) V_{21}(\mathbf{r})\mathrm{d}^3 r \quad . \quad (11.25)$$

где все эффекты взаимодействия частицы с мишенью в начальном и конечном состояниях передаются **фактором искажения** $S(\mathbf{r})$:

$$S(\mathbf{r}) = \exp\left[-\frac{i\mu}{\hbar^2 k_1}\int_0^\infty V_{\mathrm{opt},1}(\mathbf{r}-\hat{\mathbf{k}}_1 s)\mathrm{d}s - \right.$$

$$\left. -\frac{i\mu}{\hbar^2 k_2}\int_0^\infty V_{\mathrm{opt},2}(\mathbf{r}+\hat{\mathbf{k}}_2 s)\mathrm{d}s\right] \quad . \quad (11.26)$$

Заметим, что, поскольку мнимая часть оптического потенциала отрицательна, фактор $S(\mathbf{r})$ всегда меньше единицы.

На рис. 11.1 показана схема пути интегрирования при вычислении фактора искажения $S(\mathbf{r})$. Если угол рассеяния очень мал, то интеграл берется по прямолинейной траектории. Правда, на участке до точки $\mathbf{r}$ и после точки $\mathbf{r}$ подынтегральные выражения не совпадают друг с другом из-за различия оптических потенциалов частицы в каналах

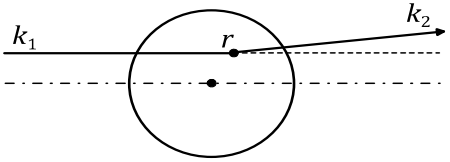


Рис. 11.1. Схема пути интегрирования при вычислении фактора искажения

1 и 2. Если, далее, пренебречь этими различиями, то фактор искажения в произвольной точке **r** определяется лишь проекцией **b** этой точки на плоскость, перпендикулярную направлению движения частиц, но не зависит от координаты z:

$$S(\mathbf{r}) \to S(\mathbf{b}) = \exp\left[-\frac{i\mu}{\hbar^2 k}\int\limits_{-\infty}^{\infty} V_{\text{opt}}(\mathbf{b}, z)\mathrm{d}z\right] \quad . \qquad (11.27)$$

Упражнения

11.1. Вычислить средний потенциал взаимодействия электрона с атомом водорода, находящимся: а) в основном состоянии $1s$, б) в возбужденном состоянии $2s$.
11.2. То же для состояния $2p, m = 0, \pm 1$.
11.3. Поток электронов рассеивается атомом водорода, находящимся в состоянии $|2p, m\rangle$, где m — проекция орбитального момента атома на некоторое направление. Сформулировать способ вычисления вероятности упругого рассеяния, сопровождающегося реориентацией момента атома $m \to m'$. Рассмотреть следующие варианты подхода:
а) метод сильной связи с учетом трех состояний атома $|2p, m\rangle$, $m = 0, \pm 1$; б) то же, включая состояние $|2s\rangle$;
в) борновское приближение с искаженными волнами;
г) плосковолновое борновское приближение.
11.4. Нуклон неупруго рассеивается ядром на малый угол. Вычислить фактор искажения $S(\mathbf{b})$:
а) для оптического потенциала прямоугольной формы;
б) для оптического потенциала гауссовой формы.

Лекция 12. Резонансное рассеяние

§ 12.1. Резонансы в задаче о двух связанных каналах

В § 10.2 мы рассматривали рассеяние при такой энергии полной системы, когда наряду с упругим возможно и неупругое рассеяние. Это было отражено в асимптотическом условии (10.7), требующем, чтобы

канальные функции $\mathrm{u_n}(\mathbf{r})$ в неупругих каналах представляли собой расходящиеся сферические волны. Если же энергия недостаточна для возбуждения некоторого состояния мишени, то в этом канале асимптотическая канальная функция $\mathrm{u_n}(\mathbf{r})$ должна иметь вид экспоненциально затухающей волны.

Сейчас мы рассмотрим случай, когда в задаче двухканального рассеяния неупругий канал закрыт. Кроме того, предположим, что энергия E полной системы близка к энергии одного из собственных состояний дискретного спектра гамильтониана $\hat{h}_2$ неупругого канала. Пусть $\{\varphi_\lambda\}$ и $\{E_\lambda\}$ — собственные функции и собственные значения гамильтониана $\hat{h}_2$:

$$\hat{h}_2\varphi_\lambda = E_\lambda\varphi_\lambda \quad . \tag{12.1}$$

Тогда наше предположение об энергии E можно записать в виде

$$E \approx E_0 \quad . \tag{12.2}$$

В этом случае в спектральном разложении гриновского оператора $\hat{G}_2(E)$ можно ограничиться одним членом:

$$\hat{G}_2(E) \approx \frac{|\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|}{\mathrm{E} - E_0} \quad . \tag{12.3}$$

Подставляя это выражение в (10.17), получаем

$$\mathrm{u_1} = \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) + \left[\hat{G}_1^{(+)}(E)V_{12}\varphi_0\right]\frac{1}{E - E_0}\langle\varphi_0|V_{21}|\mathrm{u_1}\rangle \quad . \tag{12.4}$$

Это — интегральное уравнение для канальной функции $\mathrm{u_1}(\mathbf{r})$, асимптотика которой

$$\mathrm{u_1}(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k})\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \tag{12.5}$$

дает амплитуду упругого рассеяния с учетом связи между каналами 1 и 2. Учитывая асимптотику функции $\psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)}$ и функции Грина $\hat{G}_1^{(+)}(E)$ (см. (6.20)):

$$\psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\Big|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} + f_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \quad , \qquad (12.6)$$

$$\hat{G}_1^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\Big|_{r\to\infty} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left[\psi_{1,\mathbf{k}'}^{(-)}(\mathbf{r}')\right]^*\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \quad , \qquad (12.7)$$

получаем амплитуду упругого рассеяния в виде суммы двух слагаемых:

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = f_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) + \Delta f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \quad , \qquad (12.8)$$

где $f_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ — амплитуда потенциального рассеяния в канале 1, а $\Delta f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ — дополнительная часть амплитуды, обусловленная взаимодействием связанного состояния в канале 2 с непрерывным спектром в канале 1:

$$\Delta f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\langle\psi_{1,\mathbf{k}'}^{(-)}|\hat{V}_{12}|\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\hat{V}_{21}|\mathrm{u}_1\rangle}{E-E_0} \quad . \qquad (12.9)$$

Чтобы найти эту часть амплитуды, надо решить уравнение (12.4) относительно канальной функции u_1.

Для решения воспользуемся следующим приемом: заменим уравнение (12.4) двумя связанными уравнениями:

$$\mathrm{u}_1 = \psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)} + \lambda(E)\hat{G}_1^{(+)}(E)V_{12}\varphi_0 \quad , \qquad (12.10)$$

$$\lambda(E) = \frac{\langle\varphi_0|\hat{V}_{21}|\mathrm{u}_1\rangle}{E-E_0} \quad , \qquad (12.11)$$

где $\lambda(E)$ — вспомогательная функция, определяемая соотношением (12.11). Далее подставим (12.10) в (12.11):

$$(E-E_0)\lambda(E) = \left\langle\varphi_0\middle|V_{21}\middle|\psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)}\right\rangle + \\ +\lambda(E)\,\langle\varphi_0|V_{21}\hat{G}_1^{(+)}(E)V_{12}|\varphi_0\rangle \quad ; \qquad (12.12)$$

отсюда находим $\lambda(E)$:

$$\lambda(E) = \frac{\langle\varphi_0|\hat{V}_{21}|\psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)}\rangle}{E - E_0 - \langle\varphi_0|V_{21}\left(E^{(+)} - \hat{h}_1\right)^{-1}V_{12}|\varphi_0\rangle} \quad ; \quad (12.13)$$

здесь мы подставили вместо гриновского оператора $\hat{G}_1^{(+)}(E)$ его явное выражение (10.16).

Теперь воспользуемся спектральным представлением этого оператора:

$$\frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}_1} = \sum_{\nu} \frac{|\psi_\nu\rangle\langle\psi_\nu|}{E - E_\nu} + \\ + \int \frac{|\psi_{1,\mathbf{k}'}\rangle\langle\psi_{1,\mathbf{k}'}|}{E^{(+)} - E'} \rho(\mathbf{k}')\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E' \quad , \quad (12.14)$$

где

$$\rho(\mathbf{k}') = \rho(k') = \mu\hbar k'/(2\pi\hbar)^3 \; ; \quad E' = \hbar^2 k'^2/2\mu \quad . \quad (12.15)$$

При интегрировании по энергии воспользуемся для обхода полюса известным приемом:

$$\lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{a + i\varepsilon - x} = \mathcal{P}\frac{1}{a - x} - i\pi\delta(x - a) \quad , \quad (12.16)$$

или иначе

$$\int \frac{f(x)}{a^{(+)} - x}\mathrm{d}x = \mathcal{P}\int \frac{f(x)}{a - x}\mathrm{d}x - i\pi f(a) \quad , \quad (12.17)$$

где знак $\mathcal{P}$ означает, что интеграл берется в смысле главного значения.

Подставляя (12.14) в (12.13), запишем матричный элемент, входящий в знаменатель этого выражения, в виде

$$\langle\varphi_0|V_{21}\frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}_1}V_{12}|\varphi_0\rangle = \Delta - i\frac{\Gamma}{2} \quad , \quad (12.18)$$

где вещественная и мнимая части комплексного числа (12.18) даются выражениями

$$\Delta = \sum_{\nu} \frac{\left|\langle \varphi_0 | \hat{V}_{21} | \psi_\nu \rangle\right|^2}{E - E_\nu} + \\ + \mathcal{P} \int \frac{\left|\langle \varphi_0 | \hat{V}_{21} | \psi_{1,\mathbf{k}'} \rangle\right|^2}{E - E'} \rho(k') \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}E' \quad , \qquad (12.19)$$

$$\Gamma = 2\pi \int \left|\langle \psi_{1,\mathbf{k}'} | V_{12} | \varphi_0 \rangle\right|^2 \rho(k') \mathrm{d}\Omega \quad . \qquad (12.20)$$

Таким образом, функция $\lambda(E)$ быстро меняется с энергией частицы в окрестности точки (12.2):

$$\lambda(E) = \frac{\langle \varphi_0 | V_{21} | \psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)} \rangle}{E - (E_0 + \Delta) + i\,{}^{\Gamma}/_{2}} \quad . \qquad (12.21)$$

Вместе с $\lambda(E)$ так же быстро меняется и амплитуда (12.9):

$$\Delta f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{\langle \psi_{1,\mathbf{k}'}^{(-)} | V_{12} | \varphi_0 \rangle \langle \varphi_0 | V_{21} | \psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)} \rangle}{E - (E_0 + \Delta) + i\frac{\Gamma}{2}} \quad . \qquad (12.22)$$

Дальнейшие выкладки проведем для случая, когда оператор межканального взаимодействия $\hat{V}_{12}$ связывает состояние φ_0 закрытого канала 2 лишь с s −волной непрерывного спектра в канале 1. Согласно § 3.2, волновые функции $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ в этом случае заменяются выражениями

$$\psi_{1,\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \to \mathrm{e}^{i\delta_0} \psi_{1,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad , \\ \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) \to \mathrm{e}^{-i\delta_0} \psi_{1,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \, , \qquad (12.23)$$

где $\delta_0 = \delta_0(E)$ — s −фаза потенциального рассеяния в канале 1, а $\psi_{1,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — вещественная функция.

Подставляя их в (12.20) и (12.22), получаем

$$\Gamma = \frac{k\mu}{\pi\hbar^2}\left|\langle\psi_{1,\mathbf{k}}|V_{12}|\varphi_0\rangle\right|^2 \quad , \qquad (12.24)$$

$$\Delta f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{1}{2k}\mathrm{e}^{2i\delta_0}\frac{\Gamma}{E-(E_0+\Delta)+i\,\Gamma/2} \quad . \qquad (12.25)$$

Назовем амплитуду $\Delta f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \equiv f_{\mathrm{res}}$ **резонансной амплитудой** рассеяния и будем записывать ее в виде

$$f_{\mathrm{res}} = -\frac{1}{2k}\mathrm{e}^{2i\delta_0}\frac{\Gamma}{E-E_r+i\,\Gamma/2} \quad , \qquad (12.26)$$

где

$$E_r = E_0 + \Delta \quad . \qquad (12.27)$$

Точку $E = E_r$ будем называть **энергией резонанса**. Как видим, она не совпадает с положением связанного состояния в закрытом канале. В связи с этим параметр Δ будем называть **сдвигом резонанса.** Его значение дается формулой (12.19), которая показывает, что этот сдвиг обусловлен взаимодействием связанного состояния в канале 2 с непрерывным спектром в канале 1.

Полная амплитуда рассеяния (12.8) есть сумма резонансной амплитуды (12.26) и амплитуды потенциального рассеяния $f^0(\mathbf{k}',\mathbf{k})$, которая, в отличие от нее, плавно меняется с энергией в окрестности резонанса:

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \equiv f_{\mathrm{pot}} + f_{\mathrm{res}} \quad . \qquad (12.28)$$

Вероятность упругого рассеяния есть сумма трех слагаемых

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left|f_{\mathrm{pot}} + f_{\mathrm{res}}\right|^2 = \left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{pot}} + \left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{res}} + \left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{int}} : \qquad (12.29)$$

сечение потенциального рассеяния

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{pot}} = \left|f_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\right|^2 \quad ; \qquad (12.30)$$

сечение резонансного рассеяния

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{res}} = \frac{1}{4k^2}\frac{\Gamma^2}{(E-E_r)^2+{\Gamma^2}/{4}} \quad ; \qquad (12.31)$$

интерференционный член

$$\left.\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right|_{\mathrm{int}} = 2\mathrm{Re}\{f_{\mathrm{pot}}\ f_{\mathrm{res}}^{*}\} \quad . \qquad (12.32)$$

Выражение (12.31) называется **формулой Брейта—Вигнера**. Из нее видно, что сечение резонансного рассеяния достигает максимального значения в точке $E = E_r$ и уменьшается вдвое при отклонении от нее на величину $\pm {1}/{2}\,\Gamma$. Будем называть параметр Γ **шириной резонанса.** Если $\Gamma \ll E_r$, то максимум в сечении (12.31) симметричен. Резонанс же в полном сечении (12.29), как правило, всегда асимметричен благодаря интерференционному слагаемому (12.32).

Мы рассматриваем случай, когда резонанс проявляется только в s −волне. Поэтому, используя (3.25), выделим в амплитуде потенциального рассеяния соответствующее слагаемое

$$f_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = \frac{1}{2ik}\left(\mathrm{e}^{2i\delta_0}-1\right) + \tilde{f}_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \quad , \qquad (12.33)$$

оставив в амплитуде $\tilde{f}_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ вклад всех других волн

$$\tilde{f}_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = \sum_{\ell\neq 0} f_\ell(\mathbf{k}',\mathbf{k}) =$$

$$= \frac{1}{2ik}\sum_{\ell\neq 0}(2\ell+1)\left(\mathrm{e}^{2i\delta_\ell}-1\right)\mathrm{P}_\ell(\cos\theta) \quad . \qquad (12.34)$$

Тогда полная амплитуда s −рассеяния принимает вид:

$$f_{\ell=0} = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_0} - 1\right) - \frac{1}{2k} e^{2i\delta_0} \frac{\Gamma}{E - E_r + i\frac{\Gamma}{2}} \quad . \quad (12.35)$$

Подставляя (12.33) в (12.32), видим, что в дифференциальном сечении резонансная амплитуда интерферирует со всеми парциальными амплитудами потенциального рассеяния. В интегральном же сечении после интегрирования по углам вылета рассеянной частицы, резонансная амплитуда интерферирует (в рассматриваемом случае) лишь с s −волновой частью амплитуды потенциального рассеяния:

$$\sigma = 4\pi \left| \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_0} - 1\right) - \frac{1}{2k} e^{2i\delta_0} \frac{\Gamma}{E - E_r + i\,\Gamma/2} \right|^2 + \\ + \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell \neq 0} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell \quad . \quad (12.36)$$

Начиная с формулы (12.23), все дальнейшие конкретные выражения были получены нами для частного случая, когда состояние φ_0 закрытого канала 2 связано лишь с s −волной непрерывного спектра в канале 1. Однако общая структура этих выражений, равно как и общие заключения о характере интерференции между резонансным и потенциальным рассеяниями, остаются в силе, когда эта связь касается любой другой волны.

§ 12.2. Резонансы в рассеянии и распадающиеся состояния

Появление резонанса в рассеянии частицы x на мишени A связано с образованием возбужденного квазистационарного состояния составной системы $(x + A)^*$:

$$\begin{array}{l} (x+A) \longrightarrow (x+A) \\ \quad \searrow (x+A)^* \nearrow \end{array} \qquad (12.37)$$

Покажем, что время жизни этого квазистационарного состояния τ и ширина резонанса Γ связаны соотношением

$$\Gamma\tau = \hbar \quad ; \qquad (12.38)$$

ввиду сходства с соотношением неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ его иногда записывают в виде

$$\Delta E \Delta t = \hbar \qquad (12.39)$$

и называют **соотношением неопределенности для энергии и времени.**

Для рассмотрения воспользуемся двухканальной задачей предыдущего параграфа. Пусть к моменту времени $t = 0$ составная система $(x + A)$ находится в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}, t = 0) = \Phi_2(\xi)\varphi_0(\mathbf{r}) \quad , \qquad (12.40)$$

т.е. представляет собой связанное состояние частицы x относительно возбужденного состояния ε_2 мишени A. Согласно принятым в § 10.2 обозначениям, энергия связи частицы x относительно этого состояния составляет

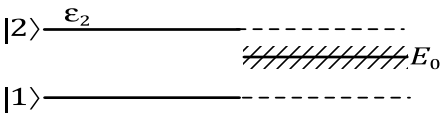


Рис. 12.1. Схема расположения связанного состояния частицы относительно возбужденного состояния мишени.

$$\varepsilon_b = \varepsilon_2 - E_0 \qquad (12.41)$$

(рис. 12.1). Полный гамильтониан системы $(x + A)$ дается выражением (8.5):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(\xi, \mathbf{r}) \quad , \qquad (12.42)$$

где $\hat{H}_0$ — гамильтониан невзаимодействующих между собой подсистем x и A;

$$\widehat{H}_0 = \widehat{\mathcal{H}}_A - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 \quad , \qquad (12.43)$$

а $\widehat{V}(\xi, \mathbf{r})$ оператор взаимодействия между ними. Волновая функция (12.40) не является собственной функцией гамильтониана $\widehat{H}$; а лишь определяет начальное условие для решения нестационарного уравнения Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\xi, \mathbf{r}, t) = \widehat{H}\Psi(\xi, \mathbf{r}, t) \quad . \qquad (12.44)$$

Под влиянием межканального взаимодействия $\widehat{V}(\xi, \mathbf{r})$ система может переходить из состояния (12.40) в открытый канал 1. Вероятность перехода в единицу времени рассчитывается по общим формулам квантовой теории переходов [2]:

$$\frac{\mathrm{d}\Lambda}{\mathrm{d}E_f\,\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\int \Phi_1^*(\xi)\psi_{1,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\widehat{V}(\xi, \mathbf{r})\Phi_2(\xi)\varphi_0(\mathbf{r})\mathrm{d}\xi\mathrm{d}^3r\right|^2 \times$$

$$\times\, \rho(\mathbf{k})\delta\big(E_f - E_0\big) \quad , \quad (12.45)$$

где $\mathbf{k}$ — импульс частицы x в открытом канале, $E_f = \hbar^2\mathbf{k}^2/(2\mu)$ — её энергия, а $\rho(\mathbf{k})$ — плотность конечных состояний. Величина $\mathbf{k}$ в (12.45) пока произвольна. Интегрируя (12.45) по всем возможным конечным состояниям, т.е. по всем направлениям вылета частицы x и её энергии, получаем суммарную вероятность перехода в единицу времени **(скорость распада)**:

$$\Lambda = \frac{2\pi}{\hbar}\int \left|\langle\psi_{1,\mathbf{k}}|V_{12}|\varphi_0\rangle\right|^2 \rho(\mathbf{k})\,\mathrm{d}\Omega \quad ; \qquad (12.46)$$

теперь, благодаря δ-функции от энергии в (12.45) величина импульса испускаемой частицы строго определена энергией возбуждения мишени A и энергией связи частицы x в квазистационарном состоянии $(x + A)^*$:

$$k = \frac{\sqrt{2\mu(\varepsilon_2 - \varepsilon_b)}}{\hbar} \quad . \qquad (12.47)$$

Сравнивая (12.46) и (12.20), видим, что ширина уровня Γ — это скорость распада квазистационарного состояния, выраженная в единицах $\hbar$:

$$\Gamma = \hbar\,\Lambda \quad . \qquad (12.48)$$

Определив **среднее время жизни** состояния τ как величину, обратную скорости его распада:

$$\tau = 1/\Lambda = \hbar\,/\Gamma \quad , \qquad (12.49)$$

мы приходим к «соотношению неопределенностей» (12.38).

§ 12.3. Признаки резонанса

Резонансное поведение сечений взаимодействия различных частиц и систем друг с другом сопровождается особым поведением в резонансной области фаз рассеяния, элементов S −матрицы и других характеристик процесса столкновения. Мы назовем все это **признаками резонанса**. Их бывает полезно иметь в виду при теоретическом рассмотрении резонансных явлений.

Возьмем, например, выражение (12.35) для амплитуды рассеяния частицы в s −состоянии, в котором учтены ее прямое (потенциальное) и резонансное взаимодействия с мишенью, и перестроим его в соответствии с общими формулами теории S −матрицы:

$$f_{\ell=0} = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_0}\frac{E - E_r - i\,\Gamma/2}{E - E_r + i\,\Gamma/2} - 1\right) =$$

$$= \frac{1}{2ik}\,(S_0(E) - 1) \quad . \qquad (12.50)$$

Отсюда получаем диагональный элемент S −матрицы, соответствующий парциальной волне с $\ell = 0$:

$$S_0(E) = \mathrm{e}^{2i\delta_0} \frac{E - E_r - i\,\Gamma/2}{E - E_r + i\,\Gamma/2} \qquad (12.51)$$

(напомним, что δ_0 — это фаза потенциального рассеяния при $\ell = 0$). Рассматривая S −матрицу как функцию энергии во всей комплексной плоскости E, видим, что $S_0(E)$ имеет полюс в точке

$$E = E_r - i\frac{\Gamma}{2} \qquad (12.52)$$

расположенной в четвертом квадранте этой плоскости (рис 12.2). Чем ближе этот полюс к действительной оси, тем уже наблюдаемый резонанс.

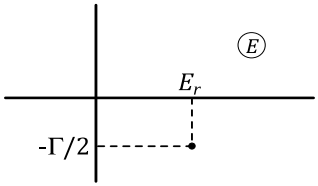


Рис. 12.2. Полюс S −матрицы в комплексной E-плоскости, соответствующей резонансу.

Элемент S −матрицы (12.51) по модулю равен единице. Это позволяет внести вещественную функцию $\delta_0^{\mathrm{tot}}(E)$:

$$S_0(E) = \exp(2i\delta_0^{\mathrm{tot}}(E)) \quad , \qquad (12.53)$$

которую называют **полной фазой рассеяния**; она включает в себя эффект и потенциального и резонансного взаимодействий частицы с мишенью. Сравнивая (12.53) и (12.51), выразим полную фазу $\delta_0^{\mathrm{tot}}(E)$ через фазу потенциального рассеяния и параметры резонанса E_r и Γ:

$$\delta_0^{\mathrm{tot}}(E) = \delta_0(E) + \mathrm{arctg}\frac{\Gamma/2}{E - E_r} \quad . \qquad (12.54)$$

Последнее слагаемое назовем **фазой резонансного рассеяния**:

$$\delta_0^{\text{res}}(E) = \text{arctg}\frac{\Gamma/2}{E - E_r} \quad . \qquad (12.55)$$

В точке $E = E_r$ фаза рассеяния (12.55) проходит через $\pi/2$; скорость прохождения фазы через $\pi/2$ определяется шириной резонанса Г.

§ 12.4. Резонансный механизм расщепления составных систем

Пусть система, состоящая из подсистем A и x, находится в связанном (для определенности — основном) состоянии $(x + A)_0$ и описывается волновой функцией $\Psi_0(\xi, \mathbf{r})$. Под влиянием некоторого внешнего возмущения:

$$\hat{T} = \hat{T}(\xi, \mathbf{r}) \quad ,$$

которое, вообще говоря, воздействует как на внутренние степени свободы мишени, так и непосредственно на части x, система может расщепляться на свои составные части. Таково, например, фоторасщепление атомов и ядер, неупругое рассеяние быстрых электронов, или других частиц и т.п. Рассмотрим переходы из основного состояния системы $(x + A)_0$ в такую область непрерывного спектра $(x + A)$, где открыт только один канал, соответствующий основному состоянию мишени A (рис. 12.3). Если, как и в предыдущих параграфах, E — это энергия частицы x относительно основного состояния мишени A, то такая область фиксируется условием

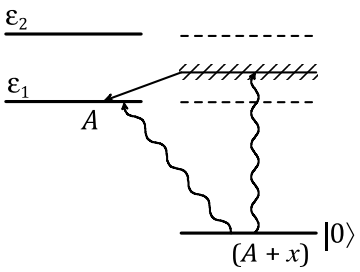
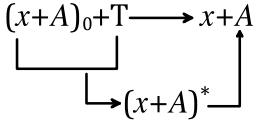


Рис. 12.3 Схема прямого и резонансного переходов при расщеплении составной системы.

$$0 < E < \varepsilon_2 \quad . \qquad (12.56).$$

Допустим, что в ней при энергии E_0 находится квазистационарное состояние системы $(x+A)^*$, представляющее собой связанное состояние частицы x относительно возбужденного состояния мишени ε_2: $\Psi(\xi, \mathbf{r}) = \Phi_2(\xi)\varphi_0(\mathbf{r})$; тогда расщепление системы $(x+A)_0$ под влиянием возмущения $\hat{T}(\xi, \mathbf{r})$ может идти двумя путями — прямо и через возбуждение, а потом распад квазистационарного состояния:



(12.57)

Интерференция двух механизмов приводит к характерной энергетической зависимости вероятности расщепления в окрестности квазистационарного состояния. Рассмотрим этот вопрос в рамках задачи о двух каналах, считая, что возмущение $\hat{T}(\xi, \mathbf{r})$ можно трактовать по теории возмущений.

Амплитуда процесса расщепления (12.57) есть матричный элемент

$$F_{fi}(E) = \left\langle \Psi \middle| \hat{T}(\xi, \mathbf{r}) \middle| \Psi_0 \right\rangle \quad , \tag{12.58}$$

где

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}) = u_1(\mathbf{r})\Phi_1(\xi) + u_2(\mathbf{r})\Phi_2(\xi) \tag{12.59}$$

решение стационарного уравнения Шредингера (10.1) с дополнительными условиями:

$$\begin{matrix} u_1(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = e^{i\mathbf{kr}} + \text{расходящаяся волна} \\ u_2(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \qquad\qquad \text{затухающая волна} \end{matrix} \quad . \tag{12.60}$$

Канальные функции $u_1(\mathbf{r})$ и $u_2(\mathbf{r})$ удовлетворяют системе уравнений (10.13), которую мы решим приближенно, приняв все те допущения, которые были сделаны в § 12.1. Учитывая изменение асимптотических условий (12.60) по сравнению с (10.14), получаем:

$$u_1 = \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} + \tilde{\lambda}(E)\frac{1}{E^{(-)} - \hat{h}_1} V_{12}\varphi_0 \quad , \qquad (12.61)$$

$$u_2 = \tilde{\lambda}(E)\varphi_0 \quad , \qquad (12.62)$$

где

$$\tilde{\lambda}(E) = \frac{\langle \varphi_0 | V_{21} | \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} \rangle}{E - E_r - i\,\Gamma/2} \quad , \qquad (12.63)$$

причем резонансные параметры E_r и Γ — те же, что были получены в § 12.1.

Подставляя (12.61), (12.62) в (12.59) и далее в (12.58), для амплитуды расщепления получаем

$$F_{fi}(E) = \langle \Phi_1 \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle +$$

$$+\tilde{\lambda}^* \left\{ \langle \Psi_r | \hat{V}(\xi, \mathbf{r}) \frac{|\Phi_1\rangle\langle\Phi_1|}{E^{(+)} - \hat{h}_1} \hat{T} | \Psi_0 \rangle + \tilde{\lambda}(E) \langle \Psi_r | \hat{T} | \Psi_0 \rangle \right\}. \qquad (12.64)$$

Физический смысл, входящих сюда матричных элементов довольно прост. Первое слагаемое есть амплитуда прямого перехода в открытый канал. Последнее — амплитуда двухступенчатого перехода, где $\langle \Psi_r | \hat{T} | \Psi_0 \rangle$ — амплитуда возбуждения квазистационарного состояния Ψ_r; множитель $\lambda(E)$ содержит матричный элемент его распада. Второе слагаемое в (12.64) вычислим приближённо, пренебрегая интегралом в смысле главного значения:

$$\langle \Psi_r | \hat{V}(\xi, \mathbf{r}) \frac{|\Phi_1\rangle\langle\Phi_1|}{E^{(+)} - \hat{h}_1} \hat{T} | \Psi_0 \rangle \to -i\pi \langle \varphi_0 | V_{21} | \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} \rangle \times$$

$$\times \langle \Phi_1 \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle \ . \qquad (12.65)$$

После такого допущения амплитуду перехода $F_{fi}(E)$ можно записать в виде:

$$F_{fi}(E) = \langle \Phi_1 \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle \left\{ \frac{E - E_r}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} + \frac{\Gamma/2}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} \times \right.$$

$$\times \frac{\langle \Psi_r | \hat{T} | \Psi_0 \rangle}{\pi \langle \varphi_0 | V_{21} | \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} \rangle \langle \Phi_1 \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle} \Bigg\} . \qquad (12.66)$$

Обозначим входящее сюда отношение матричных элементов символом q:

$$q = \frac{\langle \Psi_r | \hat{T} | \Psi_0 \rangle}{\pi \langle \varphi_0 | V_{21} | \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} \rangle \langle \Phi_1 \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle} \quad ; \qquad (12.67)$$

введём также переменную ε, характеризующую относительное отклонение от резонанса:

$$\varepsilon = \frac{E - E_r}{\Gamma/2} \quad . \qquad (12.68)$$

В новых обозначениях формула (12.67) для амплитуды перехода принимает вид

$$F_{fi}(E) = \langle \Phi_1 \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle \frac{\varepsilon + q}{\varepsilon + i} \quad . \qquad (12.69)$$

Следовательно, вероятность (или эффективное сечение) процесса расщепления описывается формулой

$$\sigma(E) = \sigma_0 \frac{(\varepsilon + q)^2}{\varepsilon^2 + 1} \quad , \qquad (12.70)$$

где

$$\sigma_0 = |\langle \Phi_1 \psi_{1,\mathbf{k}}^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle|^2 \qquad (12.71)$$

— это эффективное сечение прямого процесса расщепления без учёта переходов через квазистационарное состояние.

Формула (12.70) называется **формулой Фано**. Мы получили ее для простого случая, когда имеется один открытый и один закрытый каналы. В случае большего числа каналов формула (12.70) несколько видоизменяется.

Входящий в (12.70) безразмерный параметр q называется **профильным индексом** резонанса: его вели-

чина и знак характеризуют форму (профиль) резонанса в сечении расщепления $\sigma(E)$. При $|q|\sim 1$ резонанс особенно сильно асимметричен. Если $|q| > 1$, резонанс воспринимается как превышение над «фоном» прямых переходов, если $|q| < 1$ — как провал в сечении.

Упражнения

12.1. Квазистационарное («автоионизационное») состояние $2s2p\ ^1\mathrm{P}$ атома гелия расположено при энергии возбуждения 60.1 эВ — между первым порогом ионизации $(e + \mathrm{He}^+(\mathrm{n} = 1)$; 24.5 эВ) и вторым порогом ионизации $(e + \mathrm{He}^+(\mathrm{n} = 2)$; 65.1 эВ). Оценить время жизни этого состояния, приняв следующие допущения: а) волновая функция состояния $2s2p\ ^1\mathrm{P}$ есть произведение водородоподобных функций с зарядом $\mathrm{Z} = 2$; б) волновую функцию вылетающего электрона аппроксимировать плоской волной; в) его воздействием на $1s$-электрон иона He^+ в конечном состоянии пренебречь.

12.2. Резонанс $2s2p\ ^1\mathrm{P}$ в атоме гелия изучается путем измерения спектров энергетических потерь при рассеянии быстрых монохроматических электронов:

$$\mathrm{He}\left(1s^2\ ^1\mathrm{S}\right) + e \rightarrow \mathrm{He}^*(2s2p^1\mathrm{P}) + e' \ .$$

Пользуясь борновским приближением, построить оператор возмущения $\hat{T}(\xi, \mathbf{r})$ для расчета профильного индекса резонанса, наблюдаемого при определенном угле рассеяния θ. Показать, что при малых θ профиль резонанса не зависит от угла рассеяния.

12.3. Выразить сечение $s-$рассеяния медленных нейтронов ядром $\sigma(E)$ в окрестности изолированного резонанса E_r через длину рассеяния a, соответствующую амплитуде потенциального рассеяния, положение и ширину резонанса. Как сказывается знак длины рассеяния a на профиле резонанса?

Лекция 13. Многочастичная теория столкновений в t-матричной формулировке

§ 13.1. Метод Кермана — Мак-Мануса — Талера

Метод Кермана — Мак-Мануса — Талера (сокращенно: КМТ) является одним из основных методов теории взаимодействия адронов с ядрами при высоких и «промежуточных» энергиях. Его применение тесно связано с разработкой общей концепции оптического потенциала. В отличие от низких энергий «микроскопическая» теория оптического потенциала при высоких энергиях опирается не на потенциал парного взаимодействия между налетающей частицей и ядерными нуклонами, а на соответствующие двухчастичные амплитуды — двухчастичные $\hat{t}$-операторы. В связи с этим и всю систему уравнений, описывающих взаимодействие налетающей частицы с ядром, удобно переформулировать на языке теории t-матрицы (см. лекцию 6).

Если известен потенциал взаимодействия налетающей на ядро частицы с каждым из нуклонов ядра $v_i = v_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$, то амплитуду упругого или неупругого рассеяния частицы на ядре можно найти с помощью $\hat{t}$ –оператора:

$$F(0, \mathbf{k} \to \mathrm{n}, \mathbf{k}') \equiv F_{\mathrm{n},0}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \\ = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle \mathrm{n}, \mathbf{k}'|\hat{T}|0, \mathbf{k}\rangle \quad , \qquad (13.1)$$

который действует в пространстве координат частицы и внутренних координат ядра и удовлетворяет уравнению Липпмана — Швингера:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E^{(+)} - \hat{H}_0}\hat{T} \quad ; \qquad (13.2)$$

здесь $(\mathrm{n}, \mathbf{k})$ — совокупность квантовых чисел ядра и частицы; $|0\rangle$ — символ основного состояния ядра;

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^{A} \hat{v}_i\,(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) \qquad (13.3)$$

— оператор потенциальной энергии взаимодействия частицы с ядром;

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_A + \hat{K} \qquad (13.4)$$

— гамильтониан невзаимодействующих между собой частицы и ядра ($\hat{H}_A$ —внутренний гамильтониан ядра; $\hat{K}$ — кинетическая энергия частицы).

Сопоставим уравнения (13.1) — (13.4) с уравнениями одночастичной оптической модели. Согласно оптической модели, ядро действует на частицу как объект, не имеющий внутренних степеней свободы, и их взаимодействие описывается оптическим потенциалом $\hat{V}_{\text{opt}}$, который есть оператор (вообще говоря, нелокальный) в пространстве координат частицы. Оптический потенциал $\hat{V}_{\text{opt}}$ определяет волновую функцию частицы, рассеиваемой ядром:

$$\left(\hat{K} + \hat{V}_{\text{opt}} - E\right)\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad . \qquad (13.5)$$

В отличие от оператора (13.2) t-оператор оптической модели $\hat{T}_{\text{opt}}$, для которого справедливо уравнение

$$\hat{T}_{\text{opt}} = \hat{V}_{\text{opt}} + \hat{V}_{\text{opt}} \frac{1}{E^{(+)} - \hat{K}} \hat{T}_{\text{opt}} \quad , \qquad (13.6)$$

также действует лишь в пространстве координат частицы.

Если взять среднее от обеих частей уравнения (13.2) по основному состоянию ядра-мишени, то мы уравнения (13.6) не получим: оператор $\langle 0|\hat{T}|0\rangle$ определяется бесконечной системой зацепляющихся уравнений

$$\langle 0|\hat{T}|0\rangle =$$

$$= \langle 0|V|0\rangle + \sum_{\text{n}} \langle 0|V|\text{n}\rangle \frac{1}{E^{(+)} - \varepsilon_{\text{n}} - \hat{K}} \langle \text{n}|\hat{T}|0\rangle\,, \qquad (13.7)$$

$$\langle \mathrm{n}|\hat{T}|0\rangle = \langle \mathrm{n}|V|0\rangle + \sum_{\mathrm{n}'} \langle \mathrm{n}|V|\mathrm{n}'\rangle \frac{1}{E^{(+)} - \varepsilon_{\mathrm{n}'} - \hat{K}} \langle \mathrm{n}'|\hat{T}|0\rangle,$$

куда кроме среднего $\langle 0|V|0\rangle$ входит вся матрица взаимодействия частицы с ядром $\langle \mathrm{n}|V|\mathrm{n}'\rangle$. Значит, оптический потенциал не сводится к среднему от потенциала (13.3) по основному состоянию ядра.

Чтобы построить для оператора $\langle 0|\hat{T}|0\rangle$ уравнение вида (13.6), дадим новое представление уравнению (13.2), которое эквивалентно исходному, но удобнее его, так как позволяет более выгодно сгруппировать матричные элементы, соответствующие упругому и неупругому рассеяниям частицы на ядре. Для этого введем операторы $\hat{\mathcal{P}}$ и $\hat{\mathcal{Q}}$, проектирующие все операторы и волновые функции на основное состояние ядра и ортогональное ему подпространство всех возбужденных состояний:

$$\hat{\mathcal{P}} \equiv |0\rangle\langle 0| \ , \qquad \hat{\mathcal{Q}} \equiv \sum_{\mathrm{n}\neq 0} |\mathrm{n}\rangle\langle \mathrm{n}| \ ; \ \hat{\mathcal{P}} + \hat{\mathcal{Q}} = 1 \ . \quad (13.8)$$

С их помощью легко выразить t-оператор через новый оператор $\hat{U}$ («потенциальный оператор»):

$$\hat{T} = \hat{U} + \hat{U} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \hat{T} \quad ; \qquad (13.9)$$

для которого получается уравнение

$$\hat{U} = \hat{V} + \hat{V} \frac{\hat{\mathcal{Q}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \hat{U} \quad ; \qquad (13.10)$$

В самом деле, исключая из (13.9) и (13.10) оператор $\hat{U}$, мы возвращаемся к соотношению (13.2), связывающему операторы $\hat{T}$ и $\hat{V}$:

$$\hat{U} = \left\{ 1 - \hat{V} \frac{\hat{\mathcal{Q}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \right\}^{-1} \hat{V} \quad , \qquad (13.11)$$

$$\hat{T} = \left\{1 - \hat{V}\frac{\hat{Q}}{E^{(+)} - \hat{H}_0}\right\}^{-1} \hat{V}\left\{1 + \frac{\hat{\mathcal{P}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0}\hat{T}\right\} \quad ,$$

$$\left\{1 - \hat{V}\frac{\hat{Q}}{E^{(+)} - \hat{H}_0}\right\}\hat{T} = \hat{V}\left\{1 + \frac{\hat{\mathcal{P}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0}\hat{T}\right\} \quad ,$$

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{\hat{Q} + \hat{\mathcal{P}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0}\hat{T} \quad ; \quad \hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E^{(+)} - \hat{H}_0}\hat{T} \ .$$

Удобство нового представления (13.9), (13.10) заключается в том, что среднее от $\hat{U}$ по основному состоянию ядра и есть искомый оптический потенциал:

$$\langle 0|\hat{U}|0\rangle = V_{\text{opt}} \quad . \qquad (13.12)$$

Действительно, если взять среднее по основному состоянию ядра от обеих частей уравнения (13.9), то мы получим уравнение оптической модели (13.6):

$$\langle 0|\hat{T}|0\rangle = \langle 0|\hat{U}|0\rangle + \langle 0|\hat{U}|0\rangle\frac{1}{E^{(+)} - \hat{K}}\langle 0|\hat{T}|0\rangle \quad (13.13)$$

(здесь, как и в предыдущих лекциях, мы отсчитываем энергию от основного состояния ядра-мишени, т.е. $\langle 0|\hat{H}_A|0\rangle = \varepsilon_0 = 0$.)

Конечно, соотношения (13.10), (13.13) дают лишь формальное решение задачи. Все трудности решения исходного уравнения (13.2), связанные с суммированием по бесконечному набору возбужденных состояний ядра-мишени, перешли теперь в уравнение (13.10) для потенциального оператора.

Принципиальным недостатком изложенного формализма является то, что мы отправлялись от двухчастичных потенциалов взаимодействия между налетающей на ядро частицей и нуклоном ядра-мишени. Такой подход, по крайней мере, «неэкономен», так как для протонов, нейтронов или мезонов высоких энергий надо сначала построить сами эти потенциалы, исходя из амплитуд

соответствующего двухчастичного взаимодействия, параметры которых определяются непосредственно из эксперимента. Поэтому мы поступим наоборот — перестроим уравнения (13.9) (13.10), введя в них вместо двухчастичных потенциалов v_i двухчастичные t-матрицы t_i.

Строго говоря, двухчастичная t-матрица, описывающая рассеяние падающей частицы на нуклоне ядра, и t-матрица, описывающая рассеяние частицы свободным нуклоном, — это не одно и то же. Первая (обозначим ее τ_i, если частица рассеивается на i-м нуклоне) удовлетворяет уравнению того же вида, что (13.2):

$$\tau_i = v_i + v_i \frac{1}{E^{(+)} - \widehat{H}_0} \tau_i \quad ; \qquad (13.14)$$

тогда как t-матрица рассеяния на свободном нуклоне t_i удовлетворяет обычному двухчастичному уравнению Липпмана — Швингера, куда не входит гамильтониан ядра-мишени $\widehat{H}_A$. Физическое различие между операторами t_i и τ_i заключается в том, что пространство состояний, в которые при взаимодействии с налетающей частицей может перейти ядерный нуклон, уже, чем пространство конечных или промежуточных состояний для свободного нуклона. Это связано главным образом с тождественностью ядерных нуклонов, с принципом Паули.

Мы продолжим изложение метода КМТ в упрощенном варианте: будем считать, что с точки зрения взаимодействия с налетающими частицами нуклон, находящийся в ядерном веществе, не отличается от свободного нуклона, т.е. положим $t_i = \tau_i$. Итак, перепишем уравнение (13.14) для операторов t_i:

$$t_i = v_i + v_i \frac{1}{E^{(+)} - \widehat{H}_0} t_i \quad ; \qquad (13.15)$$

Теперь, исключив v_i из уравнений (13.2) и (13.15), выразим t-оператор (13.2) непосредственно через двухчастичные t-матрицы свободных частиц:

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^{\mathrm{A}} t_i + \frac{\mathrm{A}-1}{\mathrm{A}} \left(\sum_{i=1}^{\mathrm{A}} t_i \right) \frac{1}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \hat{T} \quad . \qquad (13.16)$$

Далее, действуя по аналогии с (13.11), выразим $\hat{T}$ через новый потенциальный оператор $\hat{U}$, отличный от оператора (13.10) и определяемый уравнением

$$\hat{U} = \frac{\mathrm{A}-1}{\mathrm{A}} \left(\sum_{i=1}^{\mathrm{A}} t_i \right) \left\{ 1 + \frac{\hat{Q}}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \hat{U} \right\} \quad . \qquad (13.17)$$

Он связан с оператором $\hat{T}$ соотношением

$$\hat{T} = \frac{\mathrm{A}}{\mathrm{A}-1} \hat{U} \left\{ 1 + \frac{\hat{\mathcal{P}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \frac{\mathrm{A}-1}{\mathrm{A}} \hat{T} \right\} \quad , \qquad (13.18)$$

Здесь $\hat{\mathcal{P}}$ и $\hat{Q}$ — проекционные операторы (13.8).

В отличие от (13.9) уравнение (13.18) не является в строгом смысле уравнением типа Липпмана — Швингера и совпадает с ним лишь с точностью до членов порядка $1/\mathrm{A}$. Мы проанализируем далее систему уравнений (13.17) и (13.18) для случая $\mathrm{A} \gg 1$:

$$\hat{T} \approx \hat{U} \left\{ 1 + \frac{\hat{\mathcal{P}}}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \hat{T} \right\} \quad , \qquad (13.19)$$

$$\hat{U} = \left(\sum_{i=1}^{\mathrm{A}} t_i \right) \left\{ 1 + \frac{\hat{Q}}{E^{(+)} - \hat{H}_0} \hat{U} \right\} \quad . \qquad (13.20)$$

Взяв среднее по основному состоянию ядра-мишени от обеих частей уравнения (13.19), мы получаем уравнение оптической модели (13.6) с оптическим потенциалом:

$$V_{\mathrm{opt}} = \langle 0 | \hat{U} | 0 \rangle \quad . \qquad (13.21)$$

Разложим оптический потенциал по кратности столкновений:

$$V_{\text{opt}} = V_{\text{opt}}^{(1)} + V_{\text{opt}}^{(2)} + \cdots \quad , \tag{13.22}$$

где потенциал первого порядка есть среднее от суммы двухчастичных t-операторов по основному состоянию ядра:

$$V_{\text{opt}}^{(1)} = \langle 0| \sum_{i=1}^{\text{A}} t_i \, |0\rangle \quad , \tag{13.23}$$

потенциал второго порядка представляет собой однократную сумму по всем состояниям ядра, кроме основного:

$$V_{\text{opt}}^{(2)} = \sum_{\text{n}\neq 0} \langle 0| \sum_{i=1}^{\text{A}} t_i \, |\text{n}\rangle \frac{1}{E^{(+)} - \varepsilon_{\text{n}} - \widehat{K}} \langle \text{n}| \sum_{j=1}^{\text{A}} t_j \, |0\rangle \ , \tag{13.24}$$

и т. д.

Формулы (13.22) — (13.24) являются основными рабочими формулами метода КМТ.

§ 13.2. Двухчастичная t −матрица и оптический потенциал

Рассмотрим, как проявляются свойства амплитуд взаимодействия налетающих частиц с нуклонами ядра в свойствах оптического потенциала.

Если двухчастичная t-матрица аппроксимируется δ −оператором:

$$t_i = \text{g}\, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad , \tag{13.25}$$

то оптический потенциал первого порядка $V_{\text{opt}}^{(1)}$ просто пропорционален плотности вещества в ядре-мишени. Физический смысл аппроксимации (13.25) состоит в том, что радиус взаимодействия между налетающей частицей и нуклоном считается много меньшим, чем размеры ядра.

Выразим константу g через двухчастичную амплитуду рассеяния вперед:

$$\mathrm{g} = -\frac{2\pi\hbar^2}{\mu} f(0) \quad . \tag{13.26}$$

Подставляя (13.26) в (13.25) и далее в (13.23), получим известное в классической оптике выражение

$$V_{\mathrm{opt}}(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{\mu} f(0)\rho(\mathbf{r}) \quad . \tag{13.27}$$

Оптический потенциал (13.27) широко используется в ядерной физике, мы будем называть его **потенциалом Рэлея**.

В качестве другого примера рассмотрим двухчастичную t-матрицу, которая пропорциональна скалярному произведению начального и конечного импульсов:

$$\langle \mathbf{k}'|\hat{t}|\mathbf{k}\rangle = b\ (\mathbf{k}'\mathbf{k}) \tag{13.28}$$

(так выглядит, например, при $k \to 0$ амплитуда рассеяния p −волны на потенциале конечного радиуса:

$$f^{(\ell=1)}(E,\theta) =$$

$$= \frac{3}{2ik}\left(\mathrm{e}^{2i\delta_\ell} - 1\right)\mathrm{P}_1(\cos\theta) \underset{k\to 0}{\longrightarrow} bk^2\cos\theta = b\ (\mathbf{k}'\mathbf{k}); \tag{13.29}$$

см. § 3.2). В x −представлении такая t-матрица имеет вид (6.57):

$$\langle \mathbf{r}'|\hat{t}|\mathbf{r}\rangle = (2\pi)^3 b[\nabla_{\mathbf{r}'}\delta(\mathbf{r}')][\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r})] \quad . \tag{13.30}$$

Подставляя это выражение в (13.23), получаем оптический потенциал с градиентами:

$$V_{\mathrm{opt}}^{(1)} = -(2\pi)^3 b\nabla\rho(\mathbf{r})\nabla \tag{13.31}$$

(в ядерной физике он широко используется для описания пион-ядерного взаимодействия).

§ 13.3. Импульсное приближение

Если в уравнениях (13.19) и (13.20) или в более точных уравнениях (13.17) и (13.18) оставить только члены низшего порядка, то полная t-матрица взаимодействия частицы со сложной мишенью (ядром) превращается в сумму двухчастичных t-матриц по всем частицам (нуклонам), составляющим мишень:

$$\hat{T} = \sum_i t_i \quad . \tag{13.32}$$

В этом случае амплитуда упругого или неупругого рассеяния (13.1) есть простой матричный элемент, в который входят волновые функции только начального и конечного состояний:

$$F_{\mathrm{n0}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\langle \mathrm{n}, \mathbf{k}'| \sum_i \hat{t}_i |0, \mathbf{k}\rangle \ . \tag{13.33}$$

Приближение (13.32) называется **импульсным приближением**. Это один из самых известных приемов теории столкновений с участием сильно взаимодействующих частиц.

Если $\hat{t}$-оператор локален, т. е. зависит лишь от передаваемого импульса $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$:

$$\langle \mathbf{k}'|\hat{t}_i|\mathbf{k}\rangle = t_i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \ , \tag{13.34}$$

то, учитывая также (6.38), амплитуду рассеяния (13.33) удобно записать в виде

$$F_{\mathrm{n0}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \langle \mathrm{n}| \sum_i f_i(\mathbf{q}) \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} |0\rangle \ . \tag{13.35}$$

По форме это выражение совпадает с выражением для борновской амплитуды рассеяния на составной системе (см. лекцию 8), однако здесь $f_i(\mathbf{q})$ — истинные, а не борновские элементарные амплитуды. Переписав (13.35) в эквивалентном виде

$$F_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) =$$

$$= \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \langle \mathrm{n}| \sum_i f_i(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) \big| 0\rangle \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\, \mathrm{d}^3 r \ , \quad (13.36)$$

легко обобщить это выражение, заменив плоские волны падающей и рассеянной частиц соответствующими искаженными волнами:

$$F_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) =$$

$$= \int \psi_{\mathbf{k}'}^{(-)*}(\mathbf{r}) \langle \mathrm{n}| \sum_i f_i(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) \big| 0\rangle \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}^3 r \ , \quad (13.37)$$

Говорят, что формула (13.33) соответствует **импульсному приближению с плоскими волнами**, а формула (13.37) — **импульсному приближению с искаженными волнами**. Расчеты в рамках импульсного приближения с искаженными волнами считаются самосогласованными, если оптические потенциалы, используемые при вычислении функций $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}$, строятся (например, по методу КМТ) с помощь тех же двухчастичных амплитуд $f_i(\mathbf{q})$, что входят явно в (13.37).

На практике формулы импульсного приближения (13.35) и (13.37), полученные для локального t-оператора, используются и тогда, когда двухчастичный t-оператор нелокален. В этих случаях теоретическое обоснование импульсного приближения гораздо сложнее.

§ 13.4. Столкновения в системе трех частиц. Уравнения Фаддеева

Задача трех взаимодействующих частиц, в том числе задача о рассеянии одной частицы на связанной системе двух других, может быть решена с помощью уравнений Фаддеева (Л.Д.Фаддеев, 1960) для широкого класса реалистических двухчастичных потенциалов. В ядерной физике изучение систем трех сильновзаимо-

действующих частиц, в дополнение к изучению соответствующих двухчастичных систем, открыло возможности более глубокого исследования сильного взаимодействия. Из решения уравнений Фаддеева хорошо видно, что многие физические характеристики трехчастичных систем зависят от свойств парного взаимодействия вне массовой поверхности: эти свойства скрыты от нас, если мы обращаемся только к двухчастичным системам.

Получим уравнения Фаддеева для трехчастичной t-матрицы. Будем отправляться от уравнения Липпмана — Швингера:

$$\hat{T}(Z) = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(Z)\hat{T}(Z) \quad , \qquad (13.38)$$

где $\hat{G}_0$ — гриновский оператор свободного движения:

$$\hat{G}_0(Z) = \frac{1}{Z - \hat{H}_0} \quad , \qquad (13.39)$$

$\hat{H}_0$ — гамильтониан свободных трех частиц 1, 2 и 3, $\hat{V}$ — оператор парного взаимодействия между ними:

$$\hat{V} = \hat{V}_{12} + \hat{V}_{23} + \hat{V}_{31} \quad . \qquad (13.40)$$

Введем несколько вспомогательных операторов.

Определение 1.

$$\hat{T}^{(k)}(Z) \equiv \hat{V}_{ij} + \hat{V}_{ij}\hat{G}_0(Z)\hat{T}(Z) \quad , \qquad (13.41)$$

где $i, j = 2, 3$ при $k = 1$ и т.д. по циклу. Очевидно равенство

$$\hat{T}^{(1)}(Z) + \hat{T}^{(2)}(Z) + \hat{T}^{(3)}(Z) = \hat{T} \quad . \qquad (13.42)$$

Определение 2.

$$\hat{T}_{ij}(Z) = \hat{V}_{ij} + \hat{V}_{ij}\hat{G}_0(Z)\hat{T}_{ij}(Z) \quad , \qquad (13.43)$$

или иначе

$$\hat{T}_{ij}(Z) = \left\{1 - \hat{V}_{ij}\hat{G}_0(Z)\right\}^{-1} V_{ij} \quad , \qquad (13.44)$$

Как видно из определения (13.43), операторы $\hat{T}_{ij}(Z)$ являются двухчастичными t-матрицами частиц i и j, входящих вместе с частицей k в трехчастичную систему. Запишем (13.41) по-другому:

$$\hat{T}^{(k)}(Z) = \hat{V}_{ij} + \hat{V}_{ij}\hat{G}_0(Z)\hat{T}^{(k)}(Z) + \\ +\hat{V}_{ij}\hat{G}_0(Z)\left[\hat{T}^{(i)}(Z) + \hat{T}^{(j)}(Z)\right] \quad , \qquad (13.45)$$

т. е.

$$\left(1 - \hat{V}_{ij}\hat{G}_0\right)\hat{T}^{(k)} = \hat{V}_{ij} + \hat{V}_{ij}\hat{G}_0(Z)\left[\hat{T}^{(i)}(Z) + \hat{T}^{(j)}(Z)\right]. \qquad (13.46)$$

Умножая обе части этих равенств на оператор $\left(1 - \hat{V}_{ij}\hat{G}_0\right)^{-1}$ и учитывая (13.44), получаем систему трех уравнений — уравнения Фаддеева:

$$\hat{T}^{(k)}(Z) = \hat{T}_{ij}(Z) + \hat{T}_{ij}(Z)\hat{G}_0(Z)\left[\hat{T}^{(i)}(Z) + \hat{T}^{(j)}(Z)\right]. \qquad (13.47)$$

Уравнения Фаддеева удобно решать в импульсном представлении. Выберем в качестве полного набора переменных систем трех частиц импульс одной из них относительно центра масс двух других ($\mathbf{p}_1$), относительный импульс этих двух ($\mathbf{k}_{23}$) и суммарный импульс всех трех частиц ($\mathbf{K}$). В этих переменных гамильтониан записывается в виде

$$\hat{H}_0 = \frac{\mathbf{k}_{23}^2}{2\mu_{23}} + \frac{\mathbf{p}_1^2}{2\mu_1} + \frac{\mathbf{K}^2}{2M} \quad , \qquad (13.48)$$

где константы μ_{23}, μ_1 и M выражаются через массы частиц 1, 2 и 3:

$$\frac{1}{\mu_{23}} = \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \quad , \qquad \frac{1}{\mu_1} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_1 + m_2} \quad , \\ M = m_1 + m_2 + m_3 \quad . \qquad (13.49)$$

Гриновский оператор $\hat{G}_0(Z)$ в представлении $\mathbf{k}_{23}$, $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{K}$ диагонален:

$$\langle \mathbf{k}'_{23}, \mathbf{p}'_1, \mathbf{K}' | \hat{G}_0(Z) | \mathbf{k}_{23}, \mathbf{p}_1, \mathbf{K} \rangle = \frac{1}{Z - \frac{\mathbf{k}_{23}^2}{2\mu_{23}} - \frac{\mathbf{p}_1^2}{2\mu_1} - \frac{\mathbf{K}^2}{2M}} \times$$

$$\times \delta(\mathbf{k}'_{23} - \mathbf{k}_{23}) \delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{K}' - \mathbf{K}) \ . \quad (13.50)$$

В тех же обкладках двухчастичная t-матрица $\hat{T}_{ij}(Z)$ имеет вид

$$\langle \mathbf{k}'_{23}, \mathbf{p}'_1, \mathbf{K}' | \hat{T}_{23}(Z) | \mathbf{k}_{23}, \mathbf{p}_1, \mathbf{K} \rangle = \quad (13.51)$$

$$= \langle \mathbf{k}'_{23} | t_{23} \left(Z - \frac{\mathbf{p}_1^2}{2\mu_1} - \frac{\mathbf{K}^2}{2M} \right) | \mathbf{k}_{23} \rangle \ \delta(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{K}' - \mathbf{K}).$$

Нам потребуется также матричный элемент вида:

$$\langle \mathbf{k}_{23}, \mathbf{p}_1, \mathbf{K} | \hat{T}_{23}(Z) | \mathbf{k}_{31}, \mathbf{p}_2, \mathbf{K} \rangle.$$

Чтобы расписать его через двухчастичную t-матрицу t_{23}, выразим переменные $\mathbf{k}_{31}$ и $\mathbf{p}_2$ через взятые за основу переменные $\mathbf{k}_{23}$ и $\mathbf{p}_1$:

$$\mathbf{k}_{31} = -\frac{m_3 M}{(m_1 + m_2)(m_2 + m_3)} \mathbf{p}_1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{k}_{23} \ , \quad (13.52)$$

$$\mathbf{p}_2 = -\frac{m_2}{m_2 + m_3} \mathbf{p}_1 + \mathbf{k}_{23} \quad (13.53)$$

и т.д.

Все сильно упрощается, если три рассматриваемые частицы одинаковы. Тогда снова удобно вернуться к волновой функции трехчастичной системы. Предположим, что мы имеем дело с бозонами; в этом случае волновая функция симметрична относительно перестановки любой пары частиц:

$$\Psi = \psi(\mathbf{k}_{23}, \mathbf{p}_1) + \psi(\mathbf{k}_{31}, \mathbf{p}_2) + \psi(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{p}_3) \ , \quad (13.54)$$

и вместо системы трех уравнений мы получаем одно:

$$\psi(\mathbf{k},\mathbf{p}) = \psi_0(\mathbf{k},\mathbf{p}) + \frac{1}{Z - \frac{k^2}{m} - \frac{3}{4}\frac{p^2}{m}} \int \frac{\mathrm{d}^3 p'}{(2\pi)^3} \times$$

$$\times \left\{ \langle \mathbf{k} | t\left(Z - \frac{3}{4}\frac{p^2}{m}\right) | \frac{1}{2}\mathbf{p} + \mathbf{p}' \rangle + \right.$$

$$\left. + \langle \mathbf{k} | t\left(Z - \frac{3}{4}\frac{p^2}{m}\right) | -\frac{1}{2}\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' \rangle \right\} \psi\left(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\mathbf{p}', \mathbf{p}'\right) \ . \quad (13.55)$$

здесь $\psi_0(\mathbf{k},\mathbf{p})$ — волновая функция, описывающая свободное движение одной частицы относительного связанного состояния двух других:

$$\psi_0(\mathbf{k},\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)\varphi(\mathbf{k}) \ . \quad (13.56)$$

Уравнение (13.55) можно еще больше упростить, если считать, что частицы взаимодействуют только в s-состоянии, и это взаимодействие описывается потенциалом Ямагучи:

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = -\lambda \mathrm{g}(k)\mathrm{g}(k') \ . \quad (13.57)$$

Как было показано в § 6.3, в этом случае существует точное решение для двухчастичной t-матрицы:

$$\langle \mathbf{k}' | t(Z) | \mathbf{k} \rangle = \Lambda(Z)\mathrm{g}(\mathbf{k})\mathrm{g}(\mathbf{k}') \ . \quad (13.58)$$

Подставляя его в (13.55), сводим задачу к неоднородному интегральному уравнению, которое можно решать на ЭВМ, задав функции $\varphi(\mathbf{k})$ и $\mathrm{g}(\mathbf{k})$.

Упражнения

13.1. Длина рассеяния каона нуклоном — комплексное число

$$a_{KN} = \mathrm{Re}\, a_{KN} + i\, \mathrm{Im}\, a_{KN} \ .$$

Учитывая KN-взаимодействие только в s-состоянии, построить в приближении Рэлея оптический потенциал взаимодействия медленных каонов с ядрами. Как связан

знак вещественной части длины рассеяния со знаком вещественной части оптического потенциала?

13.2. Используя для амплитуды адрон-нуклонного рассеяния выражение (4.49), вычислить в приближении Рэлея оптический потенциал взаимодействия адрона с ядром ^{4}He. Для нахождения плотности нуклонов в ядре ^{4}He воспользоваться моделью независимых частиц с осцилляторными волновыми функциями.

13.3. Используя для амплитуды *NN*-взаимодействия выражение (4.49), найти в импульсном приближении дифференциальное сечение упругого рассеяния быстрых нейтронов ядрами ^{4}He.

13.4. В плосковолновом импульсном приближении выразить амплитуду парциального перехода $|0\rangle \longrightarrow |\mathrm{n}\rangle$ при неупругом рассеянии частиц ядром через плотность перехода $\rho_{0\mathrm{n}}(\mathbf{r})$. Элементарную двухчастичную амплитуду взять в форме (4.49).

13.5. То же для случая (13.28).

13.6. Частица x выбивает частицу y, находившуюся в связанном состоянии с волновой функцией $\psi_0(\mathbf{r}_y)$ в поле некоторого силового центра. Аппроксимируя t-матрицу xy-взаимодействия δ-оператором (13.25) и считая силовой центр неподвижным (бесконечно тяжелым), показать, что в плосковолновом импульсном приближений вероятность одновременной («на совпадение») регистрации рассеянной частицы x и выбитой частицы y дается формулой

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega_x \mathrm{d}\Omega_y} = \frac{k_x}{k_y}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{xy} \left|\psi_0(\mathbf{q}_y)\right|^2 \quad , \qquad (13.59)$$

где $\left(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega\right)_{xy}$ — дифференциальное сечение упругого xy-рассеяния;

$$\psi_0(\mathbf{q}_y) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}_y\mathbf{r}_y}\, \psi_0(\mathbf{r}_y)\mathrm{d}^3 r_y \qquad (13.60)$$

— амплитуда импульсного распределения частицы y в начальном состоянии; $\mathbf{k}_{x0}$, $\mathbf{k}_x$ и $\mathbf{k}_y$ — импульсы падающей частицы x и разлетающихся частиц x и y; $\mathbf{q}_y = \mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y - \mathbf{k}_{x0}$ — импульс частицы y в момент столкновения с налетающей частицей.

13.7. Используя результат предыдущего упражнения, выяснить качественные особенности функции угловой корреляции разлетающихся протонов в реакциях квазиупругого выбивания ^{4}He(p,2p)^{3}H и ^{16}O(p,2p)^{15}N. Учесть, что в первом случае протон выбивается из s-, а во втором — из p-оболочки.

Лекция 14. Медленные столкновения

Квантовая теория медленных столкновений, когда относительные скорости сталкивающихся подсистем много меньше, чем скорости внутреннего движения в этих подсистемах, оперирует рядом специфических понятий, с которыми мы и познакомимся в данной лекции.

§ 14.1. Поляризационный потенциал атомов

Хорошо известно, что средний кулоновский потенциал нейтрального атома (так называемый **статический потенциал**):

$$V_{\text{stat}}(r) = -\frac{\mathrm{Z}e^2}{r} + \langle 0| \sum_{i=1}^{\mathrm{Z}} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} |0\rangle \qquad (14.1)$$

экспоненциально убывает с расстоянием. Например, $V_{\text{stat}}(r)$ для атома водорода (в основном состоянии) описывается формулой

$$V_{\text{stat}}(r) = -\frac{e^2}{r}\left(1 + \frac{r}{a}\right)\mathrm{e}^{-2r/a} \quad . \qquad (14.2)$$

С точки зрения идеи об обобщенном оптическом потенциале (лекция 10) потенциал (14.1) соответствует низшему порядку разложения оптического потенциала по

кратности взаимодействия. В этом смысле поляризационный потенциал, к рассмотрению которого мы приступаем, есть потенциал второго порядка. Однако эффекты второго порядка, связанные с поляризуемостью атома, учитываются в нем специфическим образом — в условиях медленного столкновения атома с заряженной частицей, испытывающей на себе это поляризационное взаимодействие. Будем считать эту частицу точечной. Понятие поляризационного потенциала основано на идее о том, что пробная частица (электрон, ион), находясь в какой-то точке своей «траектории», поляризует атом таким образом, что, когда она переходит в другую точку $\mathbf{r}'$, атом успевает полностью перестроить свое поляризационное состояние в соответствии с новым положением частицы.

Мы видим, что в основе концепции поляризационного потенциала лежит представление об адиабатическом характере взаимодействия: изменение взаимодействия частицы с атомом происходит медленно по сравнению с характерными временами (периодами) движения внутриатомных электронов. Такое условие выполняется, когда скорость взаимодействующей с атомом частицы должна быть много меньше, чем скорость электрона в атоме:

$$v \ll v_a \quad . \tag{14.3}$$

Правда, это слишком жесткое требование: при больших параметрах пролета более существенным является ограничение не на линейную, а на угловую скорость v/r.

Зафиксируем положение пробной частицы $\mathbf{r}$ и построим оператор ее взаимодействия с атомом:

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = \hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_Z) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \quad . \tag{14.4}$$

Усреднение оператора $\hat{V}(\mathbf{r})$ по основному состоянию атома дает статический потенциал взаимодействия (14.1).

С точки зрения теории возмущений это есть сдвиг основного уровня атома $\Delta E^{(1)}$, отнесенный к фиксированной точке $\mathbf{r}$:

$$\Delta E^{(1)}(\mathbf{r}) = \langle 0|\hat{V}(\mathbf{r})|0\rangle = V_{\text{stat}}(\mathbf{r}) \quad . \qquad (14.5)$$

Рассматривая (14.4) как малое возмущение, найдем сдвиг уровня во втором порядке:

$$\Delta E^{(2)}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{n}\neq 0} \frac{\left|\langle \mathrm{n}|\hat{V}(\mathbf{r})|0\rangle\right|^2}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\mathrm{n}}} \quad ; \qquad (14.6)$$

разумеется, здесь под знаком суммы подразумевается и интегрирование по непрерывному спектру атома.

Пусть пробная частица находится далеко от атома:

$$r > a \quad . \qquad (14.7)$$

Тогда, используя известное разложение

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} = \sum_{\ell m} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}} \mathrm{Y}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_i)\mathrm{Y}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad , \qquad (14.8)$$

запишем его для случая, $r > r_i$:

$$\left.\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}\right|_{r>r_i} = \sum_{\ell m} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{r_i^\ell}{r^{\ell+1}} \mathrm{Y}_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}_i)\mathrm{Y}^*_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad . \qquad (14.9)$$

Подставляя (14.9) в (14.4) и далее в (14.6), видим, что главный вклад в потенциал второго порядка дают виртуальные дипольные переходы:

$$\left.\Delta E^{(2)}(\mathbf{r})\right|_{r>a} = -\frac{\text{const}}{r^4} \sum_{\mathrm{n}\neq 0} \frac{\left|\langle \mathrm{n}|\sum_{i=1}^{\mathrm{Z}} r_i\,|0\rangle\right|^2}{\varepsilon_{\mathrm{n}} - \varepsilon_0} \quad . \qquad (14.10)$$

Заметим, что независимо от знака заряда пробной частицы (электрон, ион) поляризационный потенциал (14.10) — это потенциал притяжения. Амплитуда поляризационного

взаимодействия просто связана с дипольной поляризуемостью атома x:

$$V_{\text{pol}}(r)\big|_{r\gg a} = -\varkappa/2r^4 \quad , \qquad (14.11)$$

$$\varkappa = \frac{2}{3}e^2 \sum_{\text{n}\neq 0} \frac{\left|\langle \text{n}|\widehat{\mathbf{D}}|0\rangle\right|^2}{\varepsilon_{\text{n}}-\varepsilon_0} \quad , \qquad (14.12)$$

где $\widehat{\mathbf{D}} = e\sum_{\text{i}} \mathbf{r}_i$ — оператор электрического дипольного момента атома.

Главное свойство поляризационного потенциала — его относительное дальнодействие. Будучи эффектом второго порядка он тем не менее гораздо существеннее на больших расстояниях, чем статический потенциал $V_{\text{stat}}(r)$.

Заметим, что если орбитальный момент атома не равен нулю, то оператор (14.4) дает поправку к $V_{\text{stat}}(r)$ и в первом порядке — за счет квадрупольного взаимодействия:

$$V_Q(r)\big|_{r\gg a} \sim \frac{1}{r^3}\langle LM|\sum r_i^2\, \text{P}_2(\cos\theta)|LM\rangle \quad , \quad (14.13)$$

при больших r оно спадает как $1/r^3$. Однако это взаимодействие исчезает при усреднении по ориентации момента атома. Поэтому оно проявляется лишь в особых ситуациях, когда момент атома ориентирован.

§ 14.2. Взаимодействие между нейтральными атомами

На больших расстояниях между атомами их взаимодействие описывается силами Ван-дер-Ваальса. Построим оператор взаимодействия двух атомов, находящихся на фиксированном расстоянии друг от друга:

$$V(\mathbf{R}) = \frac{\text{Z}_1\text{Z}_2e^2}{R} - \sum_{i=1}^{\text{Z}_2}\frac{\text{Z}_1e^2}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}_i|} - \sum_{j=1}^{\text{Z}_1}\frac{\text{Z}_2e^2}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}_j|} +$$

$$+\sum_{i,j}\frac{e^2}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}_i+\mathbf{r}_j|}\quad . \qquad (14.14)$$

При $R \gg a$ взаимодействия между ядрами компенсируются их взаимодействием с электронной оболочкой, и самым важным становится поляризационное взаимодействие, обусловленное одновременным дипольным возбуждением обоих атомов. Соответствующий член в разложении потенциала (14.14) по мультиполям имеет вид

$$V(R)|_{R\gg a}=\frac{\widehat{\mathbf{D}}_1\widehat{\mathbf{D}}_2-3\left(\widehat{\mathbf{D}}_1\mathbf{n}\right)\left(\widehat{\mathbf{D}}_2\mathbf{n}\right)}{R^3}\quad , \qquad (14.15)$$

где

$$\widehat{\mathbf{D}}_1=\sum_{i=1}^{Z_1}e\mathbf{r}_i\quad ;\quad \widehat{\mathbf{D}}_2=\sum_{j=1}^{Z_2}e\mathbf{r}_j \qquad (14.16)$$

— операторы дипольного момента двух атомов, $\mathbf{n}$ — единичный вектор в направлении межъядерной оси.

В первом порядке теории возмущений оператор (14.15) не дает вклада; во втором — приводит к силам Ван-дер-Ваальса:

$$V(R)|_{R\gg a}=-C/R^6\quad . \qquad (14.17)$$

§ 14.3. Перезарядка атомов при медленных соударениях. Понятие квазимолекулярных термов

Рассмотрим процесс перезарядки атома водорода при столкновении с протоном:

$$\mathrm{H}+\mathrm{H}^+\longrightarrow\mathrm{H}^+ +\mathrm{H}\quad . \qquad (14.18)$$

Пусть $\mathbf{R}$ — радиус-вектор, фиксирующий взаимное расположение двух ядер водорода; $\mathbf{r}_\mathrm{A}$ и $\mathbf{r}_\mathrm{B}$ — координаты электрона относительно ядер A и B.

Задача решается в адиабатическом приближении (см., например, [1, § 57]). Стационарные состояния элек-

трона при фиксированном расстоянии между ядрами таковы, что электрон в равной мере принадлежат каждому из ядер. Для простоты опустим интеграл перекрывания волновых функций электрона, локализованного вблизи ядра A и ядра B:

$$S(R) = \langle \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{A}) | \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{B}) \rangle \longrightarrow 0 \ , \qquad (14.19)$$

и тогда волновые функции стационарных состояний электрона в рассматриваемой двухцентровой системе («молекулярные орбитали») можно описать простыми комбинациями невозмущенных атомных функций:

$$\begin{aligned} \psi_\mathrm{g}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{A}) + \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{B})] \ , \\ \psi_\mathrm{u}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{A}) - \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{B})] \ . \end{aligned} \qquad (14.20)$$

Энергия всей системы $\mathrm{H} + \mathrm{H}^+$ как функция расстояния R зависит от симметрии электронной волновой функции (14.20). Для электрона, находящегося на $1s$-уровне, имеем

$$\begin{aligned} U_\mathrm{g}(R) &= \frac{e^2}{R} + \varepsilon_{1s} + \Delta V(R) + W(R) \ ; \\ U_\mathrm{u}(R) &= \frac{e^2}{R} + \varepsilon_{1s} + \Delta V(R) - W(R) \ , \end{aligned} \qquad (14.21)$$

где

$$\Delta V(R) = \langle \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{A}) | \left(-\frac{e^2}{r_\mathrm{B}} \right) | \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{A}) \rangle = \qquad (14.22)$$

$$= \langle \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{B}) | \left(-\frac{e^2}{r_\mathrm{A}} \right) | \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{B}) \rangle = -\frac{e^2}{R} \left[1 - \left(1 + \frac{R}{a} \right) \mathrm{e}^{-2R/a} \right]$$

— средняя энергия взаимодействия атомного электрона с «чужим» протоном. Величина

$$W(R) = \langle \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{A}) | \left(-\frac{e^2}{r_\mathrm{B}} \right) | \psi_0(\mathbf{r}_\mathrm{B}) \rangle = -$$

$$= -\frac{e^2}{a}\left(1 + \frac{R}{a}\right) \mathrm{e}^{-R/a} \qquad (14.23)$$

не имеет такого простого смысла; она появилась в связи с тем, что волновые функции (14.20) передают эффект «обобществления» электрона в молекулярном ионе $(\mathrm{H} + \mathrm{H}^+)$.

По мере сближения ядер качество приближения (14.20) ухудшается: все сильнее искажаются атомные волновые функции электрона; в пределе $R \to 0$ электронная волновая функция совпадает с водородоподной волновой функцией в поле заряда $\mathrm{Z} = 2$. Таким образом, при изменении межъядерного расстояния во всей области $0 < R < \infty$ энергетический спектр стационарных состояний электрона в системе $(\mathrm{H} + \mathrm{H}^+)$ меняется по закону

$$E_\mathrm{n}|_{R\to\infty} = -\frac{1}{2\mathrm{n}^2}\frac{e^2}{a} \ , \quad E_\mathrm{n}|_{R\to 0} = -\frac{2}{\mathrm{n}^2}\frac{e^2}{a} \quad . (14.24)$$

Общая картина относительного расположения энергетических уровней электрона, находящегося в поле двух ядер, называется диаграммой молекулярных («квазимолекулярных») термов или корреляционной диаграммой. Она показывает, как коррелируют определенные состояния электрона в разъединенных атомах с его состояниями в объединенном атоме (квазимолекуле). Корреляционная диаграмма для системы $(\mathrm{H} + \mathrm{H}^+)$ показана на рис. 14.1.

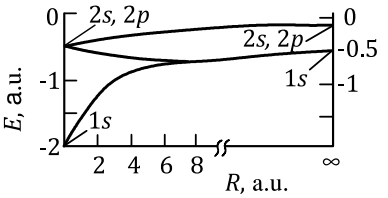


Рис.14.1. Корреляционная диаграмма для систем $(\mathrm{H} + \mathrm{H}^+)$.

Вычислим вероятность процесса перезарядки (14.18) для случая далеких (и по-прежнему

медленных: $v \ll v_a$) столкновений. Теперь движение ядер относительно друг друга можно рассматривать как классическое прямолинейное движение. Задавая прицельный параметр b, найдем расстояние между ядрами в произвольный момент времени t по формуле

$$R = R(t) = \sqrt{b^2 + v^2\, t^2} \quad . \qquad (14.25)$$

Энергия электрона, находящегося на той или иной молекулярной орбитали (14.20), есть медленно меняющаяся функция времени:

$$U_{\mathrm{g,u}}(R)\big|_{R=R(t)} \longrightarrow U_{\mathrm{g,u}}(t) \ . \qquad (14.26)$$

В таком случае временная зависимость волновых функций электрона дается квазиклассическим выражением [13]:

$$\psi_{\mathrm{g}}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(\mathbf{r}_{\mathrm{A}}) + \psi_0(\mathbf{r}_{\mathrm{B}})] \times \\ \times \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} U_{\mathrm{g}}(t')\mathrm{d}\,t'\right\} \qquad (14.27)$$

(и аналогично для $\psi_{\mathrm{u}}(t, \mathbf{r})$).

Пусть при $t \to -\infty$ электрон находился в состоянии $1s$ в поле ядра A. Рассматривая случай далеких столкновений, пренебрежем вкладом всех возбужденных ($2s$, $2p$ и т.д.) состояний электрона в атоме. Тогда общее решение «электронной» части задачи в сделанных приближениях имеет вид

$$\psi(t, \mathbf{r}) = \frac{\mathrm{c}_1}{\sqrt{2}}[\psi_{1s}(\mathbf{r}_{\mathrm{A}}) + \psi_{1s}(\mathbf{r}_{\mathrm{B}})]\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} U_{\mathrm{g}}(t')\mathrm{d}\,t'\right\} + \\ + \frac{\mathrm{c}_2}{\sqrt{2}}[\psi_{1s}(\mathbf{r}_{\mathrm{A}}) - \psi_{1s}(\mathbf{r}_{\mathrm{B}})]\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} U_{\mathrm{u}}(t')\mathrm{d}\,t'\right\}. \qquad (14.28)$$

Коэффициенты c_1 и c_2 найдем из условия

$$\psi(t \to -\infty, \mathbf{r}) = \psi_{1s}(\mathbf{r}_\mathrm{A}) \quad , \tag{14.29}$$

т.е.

$$c_1 = c_2 = 2^{-1/2} \quad . \tag{14.30}$$

Подставляя (14.30) в (14.28), получаем волновую функцию электрона при $t \to +\infty$;

$$\psi(t \to +\infty, \mathbf{r}) = \exp\left\{-i \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{U_\mathrm{g}(t) + U_\mathrm{u}(t)}{2\hbar}\,\mathrm{d}\,t\right\} \times$$

$$\times \left\{\psi_{1s}(\mathbf{r}_\mathrm{A})\cos\left[\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{U_\mathrm{g}(t) - U_\mathrm{u}(t)}{2\hbar}\,\mathrm{d}\,t\right] + \right. \tag{14.31}$$

$$\left. + \psi_{1s}(\mathbf{r}_\mathrm{B})\sin\left[\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{U_\mathrm{g}(t) - U_\mathrm{u}(t)}{2\hbar}\,\mathrm{d}\,t\right]\right\}.$$

Таким образом, вероятность перезарядки, т.е. передачи электрона от ядра A ядру B, при далеком медленном столкновении дается формулой

$$\omega(b, v) = \sin^2\left[\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{U_\mathrm{g}(t) - U_\mathrm{u}(t)}{2\hbar}\,\mathrm{d}t\right] \quad . \tag{14.32}$$

Чтобы выявить зависимость вероятности $\omega(b, v)$ от прицельного параметра b и относительной скорости ядер v, подставим в (14.32) выражения (14.21):

$$U_\mathrm{g}(t) - U_\mathrm{u}(t) = -\frac{2e^2}{a}\left(1 + \frac{R}{a}\right)\mathrm{e}^{-R/a} \quad . \tag{14.33}$$

Поскольку мы рассматриваем здесь лишь далекие столкновения, упростим далее это выражение:

$$U_{\mathrm{g}}(t) - U_{\mathrm{u}}(t) \approx -\frac{2e^2}{a}\frac{R}{a}\mathrm{e}^{-R/a} \quad . \qquad (14.34)$$

Учитывая (14.25) и подставляя (14.34) в (14.32), после интегрирования по t получаем

$$\omega(b, v) \approx \sin^2\left[\sqrt{2\pi}\,\frac{e^2}{\hbar v}\left(\frac{b}{a}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-b/a}\right] . \qquad (14.35)$$

Хотя максимум вероятности перезарядки $\omega(b, v)$ достигается при значении прицельного параметра $b = (3/2)a$, все наше рассмотрение относится лишь к далеким столкновениям ($b \gg a$); как видно из формулы (14.35), с ростом b вероятность перезарядки быстро падает. Что касается ее зависимости от скорости частиц, то в области применимости теории ($v \ll v_a$) величина $\omega(b, v)$ с ростом v также монотонно падает.

Корреляционная диаграмма квазимолекулярных термов, изображенная на рис. 14.1, относится лишь к рассматриваемому частному случаю систему $(\mathrm{H} + \mathrm{H}^+)$, которая обладает рядом специфических свойств — одинаковые ядра, «случайное» вырождение уровней по ℓ в пределе разъединенных атомов. В общем случае картина расположения квазимолекулярных термов сложнее. Особенно интересно и очень важно с физической точки зрения явление пересечения (или, как мы увидим при более внимательном рассмотрении, «квазипересечения») молекулярных термов, когда при некотором значении межъядерного расстояния R_{c} эффективная потенциальная энергия ядер $U_1(R)$ и $U_2(R)$, соответствующая двум разным электронным состояниям, принимает одно и то же значение:

$$U_1(R_{\mathrm{c}}) = U_2(R_{\mathrm{c}}) \quad . \qquad (14.36)$$

На примере системы $(\mathrm{H} + \mathrm{H}^+)$ мы видели, что понятие эффективной потенциальной энергии ядер $U(R)$

связано с представлением полной волновой функции системы в виде произведения.

$$\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \psi_{\mathrm{Nucl}}(\mathbf{R})\psi_e(\mathbf{R},\mathbf{r}) \ , \qquad (14.37)$$

где электронная волновая функция $\psi_e(\mathbf{R},\mathbf{r})$ зависит от $\mathbf{R}$ как от параметра. Такое представление приближенно, и если учесть неадиабатические слагаемые в полном гамильтониане системы, то волновую функцию $\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r})$ следует записать как суперпозицию состояний (14.37):

$$\Psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \sum_i \psi_{\mathrm{Nucl}}^{(i)}(\mathbf{R})\psi_e^{(i)}(\mathbf{R},\mathbf{r}) \ , \qquad (14.38)$$

где $\psi_e^{(i)}(\mathbf{R},\mathbf{r})$ — это полный набор электронных волновых функций, представляющих собой решение двухцентровой задачи при фиксированном расположении ядер (для нахождения волновой функции электрона, движущегося в поле двух закрепленных точечных зарядов, удобно использовать так называемые кулоновские сфероидальные функции [12]). Считая функции $\psi_e^{(i)}(\mathbf{R},\mathbf{r})$ известными, мы можем, отправляясь от точного гамильтониана квазимолекулы, получить систему связанных между собой уравнений для функций $\psi_{\mathrm{Nucl}}^{(i)}(\mathbf{R})$, описывающих движение ядер. При этом уже знакомые нам функции $U_i(R)$ по-прежнему выступают в качестве эффективной потенциальной энергии взаимодействия ядер в «каналах», соответствующих различным состояниям электрона. Однако, в отличии от адиабатического приближения, теперь они, не исчерпывают всей матрицы такого взаимодействия; ее недиагональные элементы обусловленные неадиабатическими слагаемыми в гамильтониане, связывают «каналы» между собой.

Переходы между двумя термами особенно вероятны при их сближении друг с другом, т.е. в окрестности точки пересечения R_{c}. В связи с этим рассмотрим вопрос о пересечении термов более внимательно. Допустим, что в

окрестности точки R_c достаточно рассмотреть лишь два терма 1 и 2 и пренебречь их связью с остальными; им соответствует субматрица эффективного взаимодействия ядер:

$$\begin{pmatrix} U_1(R) & W_{12}(R) \\ W_{21}(R) & U_2(R) \end{pmatrix}, \qquad (14.39)$$

причем $U_1(R_c) = U_2(R_c)$ (рис. 14.2, пунктир).

Диагонализируем матрицу (14.39) в окрестности точки R_c:

$$E(R) = \frac{U_1(R) + U_2(R)}{2} \pm \pm \sqrt{\left(\frac{U_1(R) - U_2(R)}{2}\right)^2 + W_{12}^2(R)} \quad . (14.40)$$

Два значения энергии $E(R)$, даваемые этой формулой, совпадают в некоторой точке R_c лишь при одновременном выполнении двух условии:

$$\begin{array}{l} \text{а) условие (14.36);} \\ \text{б) } W_{12}(R_c) = 0 \quad . \end{array} \qquad (14.41)$$

Случайное выполнение обоих условий (14.41) маловероятно. Может, правда, случиться, что взаимодействие между рассматриваемыми двумя термами отсутствует не только в самой точке R_c, но и в целой области R в силу каких-то особых правил запрета (связанных с симметрией электронных состояний и т.п.). Во всех других случаях невыполнение комбинированного условия (14.41) означает, что благодаря

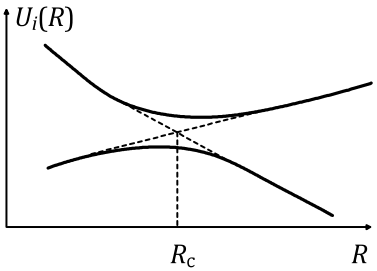


Рис. 14.2. Квазипересечение молекулярных термов.

взаимодействию между термами их фактического пересечения не происходит; имеет место ситуация, изображенная с помощью сплошных линий на рис. 14.2; ее принято называть квазипересечением термов.

§ 14.4. Кулоновское возбуждение ядер

Использование представлений, заимствованных из классической механики, характерно для многих задач квантовой теории медленных столкновений. Сейчас мы рассмотрим еще одну такую задачу, взятую, в отличие от предыдущего параграфа, из ядерной физики.

Пусть тяжелая заряженная частица заряда Z_x неупруго рассеивается ядром с зарядом Z_A, причем энергия их относительного движения E меньше высоты кулоновского барьера между ядром и частицей x:

$$E < E_{\mathrm{Coul}} = \frac{\mathrm{Z}_x \mathrm{Z}_A e^2}{R} \ , \qquad (14.42)$$

где R — радиус сильного взаимодействия в системе $A + x$. При таком условии вероятность проникновения частицы в область действия ядерных сил мала, и возбуждение ядра происходит за счет электромагнитного (в основном кулоновского) взаимодействия налетающей частицы с протонами ядра:

$$\hat{V}_{\mathrm{Coul}} = \sum_{i=1}^{\mathrm{Z_A}} \frac{\mathrm{Z}_x e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \ . \qquad (14.43)$$

На больших расстояниях между частицей x (мы будем считать ее точечной) и ядром A взаимодействие (14.43) сводится к кулоновскому взаимодействию точечных зарядов, которое, разумеется, не может приводить к возбуждению ядра. Поэтому мы исключим его из $\hat{V}_{\mathrm{Coul}}$:

$$\hat{V}_{\text{Coul}} \to \hat{V}_{\text{exc}} = \sum_{i=1}^{\text{Z}_\text{A}} \frac{\text{Z}_x e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} - \frac{\text{Z}_x \text{Z}_\text{A} e^2}{r} \quad . \qquad (14.44)$$

будем называть оператор (14.44) оператором кулоновского возбуждения ядра.

Основные закономерности кулоновского возбуждения ядер можно получить с помощью квантовой теории медленных столкновений, считая, что налетающая частица движется по классической траектории согласно законам механики. Пусть нам известна классическая траектория $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ частицы, падающей на ядро с прицельным параметром b. Следовательно, мы знаем оператор кулоновского возбуждения как функцию времени: $\hat{V}_{\text{exc}} = V_{\text{exc}}(t)$. Вероятность перехода ядра из начального состояния $|0\rangle$ в некоторое возбужденное состояние $|\text{n}\rangle$ вычислим по теории возмущений:

$$P_{\text{n}0} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \text{n} | \hat{V}_{\text{exc}}(t) | 0 \rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_\text{n} - \varepsilon_0) t \right) \text{d}t \right|^2 . \quad (14.45)$$

Подчеркнем: величина $P_{\text{n}0}$, даваемая формулой (14.45), есть относительна вероятность того, что медленная заряженная частица, налетая на ядро с определенным прицельным параметром b, индуцирует ядерный переход $|0\rangle \to |\text{n}\rangle$. Как известно, в классической механике угол рассеяния θ однозначно определяется прицельным параметром b. Таким образом, формула (14.45) позволяет рассчитывать относительную вероятность перехода $|0\rangle \to |\text{n}\rangle$ при кулоновском рассеянии частицы на заданный угол: $P_{\text{n}0} = P_{\text{n}0}(\theta)$. При этом мы полагаем, что потери энергии частицы на возбуждение ядра пренебрежимо малы по сравнению с самой энергией:

$$\varepsilon_\text{n} - \varepsilon_0 \ll E \quad . \qquad (14.46)$$

Дифференциальное сечение возбуждения перехода $|0\rangle \to |n\rangle$ есть, таким образом, дифференциальное сечение упругого рассеяния частицы на заданный угол (оно в первом приближении дается формулой Резерфорда), умноженное на относительную вероятность возбуждения:

$$\frac{d\sigma_n}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R P_{n0}(\theta) \quad . \qquad (14.47)$$

Упражнения

14.1. Используя приближение малых углов классической теории столкновений (см., например, [10, § 20]), найти дифференциальное сечение рассеяния частиц потенциалом $V(r) = -\alpha/r^4$.

14.2. Преобразовать результат (14.32) для случая, когда вероятность перезарядки много меньше единицы; рассмотреть этот случай как самостоятельную задачу, пользуясь теорией возмущений.

14.3. Сравнить возбуждение ядерных переходов «нормальной четности» $0^+ \to J^\pi$, где $\pi = (-1)^J$, при неупругом рассеянии быстрых электронов (см. лекцию 8) и в реакции кулоновского возбуждения тяжелыми заряженными частицами считая, что рассеяние электронов обусловлено их кулоновским взаимодействием с протонами ядра. При каких условиях дифференциальные сечения неупругого рассеяния в этих двух случаях выражаются через одни и те же ядерные матричные элементы?

Лекция 15. Дифракционное рассеяние

§ 15.1. Рассеяние на абсолютно черной сфере

При высоких энергиях, когда дебройлевская длина волны налетающих частиц становится много меньше размеров мишени, а их поглощение в веществе мишени велико, рассеяние частиц носит ярко выраженный дифракц

здесь σ — полное сечение адрон-нуклонного взаимодействия; $\alpha = \mathrm{Re}f(0)/\mathrm{Im}f(0)$ — отношение вещественной и мнимой частей элементарной амплитуды рассеяния на нулевой угол. Подставляя (15.37) в (15.35), запишем амплитуду упругого рассеяния в другом, эквивалентном виде:

$$F_{\mathrm{elas}}(\mathbf{q}) = \\ = \frac{ik}{2\pi}\int \mathrm{d}^2 b \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}}\left[1 - \exp\left\{-\frac{\sigma}{2}(1-i\alpha)T(\mathbf{b})\right\}\right]. \quad (15.38)$$

Выражения (15.35) и (15.38) называют **оптическим пределом** для амплитуды адрон-ядерного упругого рассеяния. При $\sigma \to 0$ они переходят в формулу плосковолнового импульсного приближения:

$$F_{\mathrm{elas}}(\mathbf{q})|_{\sigma\to 0} \to f(0)\int \rho(\mathbf{r})\mathrm{e}^{i\mathbf{qr}}\,\mathrm{d}^3 r\ , \quad (15.39)$$

в противоположном случае очень сильного поглощения ($\sigma \gg R^2$) — в амплитуду рассеяния на абсолютно черной сфере стремится:

$$F_{\mathrm{elas}}(\mathbf{q})|_{\sigma\to\infty} \to i\frac{R}{\theta}\mathrm{J}_1(kR\theta)\ . \quad (15.40)$$

Чтобы сделать аналогию между теорией Глаубера и оптической моделью еще более полной, найдем выражение для эквивалентного одночастичного потенциала $V_{\mathrm{opt}}(\mathbf{r})$; дающего в дифракционном приближении такое же описание рассеяния, что и микроскопическая теория. В потенциальной задаче (при использовании эйконального приближения) фаза рассеяния вычисляется как интеграл от потенциала по прямолинейной траектории движения частицы (формула (4.35)):

$$\chi(\mathbf{b}) = -\frac{\mu}{k\hbar^2}\int V_{\mathrm{opt}}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}z\ . \quad (15.41)$$

Сравнивая (15.41) с формулой оптического предела, где

$$\chi_{\text{opt}}(\mathbf{b}) = i \int \gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s})\rho(\mathbf{r})\mathrm{d}^3 r \ , \qquad (15.42)$$

получим

$$V_{\text{opt}}(\mathbf{b}, z) = -\frac{ik\hbar^2}{\mu} \int \gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s})\rho(\mathbf{s}, z)\mathrm{d}^2 s \ , \quad (15.43)$$

или же, если вынести медленно меняющийся сомножитель $\rho(\mathbf{r})$ из-под интеграла, получим, что эквивалентный оптический потенциал распределен по ядру так же, как плотность нуклонов:

$$V_{\text{opt}}(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{\mu} f(0)\rho(\mathbf{r}) \ . \qquad (15.44)$$

Таким образом, мы снова получили формулу (13.27) для оптического потенциала в приближении Рэлея.

§ 15.3. Неупругое и квазиупругое (некогерентное) рассеяния

Рассмотрим неупругое и квазиупругое дифракционное рассеяния частиц составной системой на примере взаимодействия адронов с ядрами. Главная проблема теории неупругого рассеяния адронов состоит в том, как совместить учет многократных столкновений налетающей частицы с нуклонами при ее прохождении через ядро с верным описанием индивидуальных особенностей не только каждого ядра, но и каждого отдельного ядерного перехода, возбуждаемого при неупругом рассеянии падающей частицы. Ключом к решению этой проблемы стало приближение одного неупругого столкновения, введенное Карапетяном, Милеевым и Титаренко (1973 г.) на основе теории Глаубера — Ситенко.

Приближение одного неупругого столкновения состоит в том, что в амплитуде неупругого рассеяния адрона опускаются вклады многократного многоступен-

чатого возбуждения ядра; однако учитываются все многократные, столкновения, при которых не происходит перестройки ядра. Это упругое перерассеяние, предшествующее акту неупругого рассеяния или следующее за ним, рассчитывается в тех же упрощающих предположениях, что используются в задаче упругого дифракционного рассеяния: приближение факторизованной плотности, приближение коммутативности между собой амплитуд рассеяния падающей частицы на отдельных нуклонах ядра и т.п.

Таким образом, амплитуда парциального перехода $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$ записывается в виде

$$F_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \approx \frac{ik}{2\pi}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}} \sum_{j=1}^{\mathrm{A}} \left[\langle \mathrm{n}|1-\gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s})|\mathrm{n}\rangle\right]^{\mathrm{A}-j-1} \times$$

$$\times \left\langle \mathrm{n}\middle|\gamma_j(\mathbf{b}-\mathbf{s})\middle|0\right\rangle \left[\langle 0|1-\gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s})|0\rangle\right]^j \mathrm{d}^2 b\,. \quad (15.45)$$

Далее пренебрежем различием между распределением плотности ядра $\rho(\mathbf{r})$ в начальном $|0\rangle$ и конечном $|\mathrm{n}\rangle$ состояниях, а недиагональный матричный элемент в (15.45) выразим через плотность перехода:

$$\langle \mathrm{n}| \sum_{j=1}^{\mathrm{A}} \gamma_{\mathrm{j}}(\mathbf{b}-\mathbf{s})\,|0\rangle = \int \gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s}) \langle \mathrm{n}| \sum_{j=1}^{\mathrm{A}} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_j})\,|0\rangle\, \mathrm{d}^3 r =$$

$$= \int \gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s})\rho_{\mathrm{n}0}(\mathbf{r})\mathrm{d}^3 r \quad . \qquad (15.46)$$

Тогда амплитуда парциального перехода принимает простой вид:

$$F_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \approx \frac{ik}{2\pi}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}}\, \mathrm{S}(\mathbf{b})\gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s})\rho_{\mathrm{n}0}(\mathbf{r})\mathrm{d}^3 r\, \mathrm{d}^2 b \ , (15.47)$$

где

$$S(\mathbf{b}) = \left[1 - \frac{1}{A}\int \rho(\mathbf{r})\gamma(\mathbf{b}-\mathbf{s})\mathrm{d}^3 r\right]^{A-1}$$

фактор искажений, отражающий эффект упругого перерассеяния в начальном и конечном состояниях.

В «оптическом пределе» амплитуда (15.47) еще более упрощается:

$$F_{n0}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{ik}{2\pi}\int \mathrm{d}^2 b\ \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}} \exp\left\{-\frac{\sigma}{2}(1 - i\alpha)T(\mathbf{b})\right\} \times$$
$$\times \langle n| \sum_j \gamma_j(\mathbf{b} - \mathbf{s}_j) |0\rangle \quad , \quad (15.48)$$

где σ и α — параметры элементарной двухчастичной амплитуды рассеяния (15.37), а $T(\mathbf{b})$ — функция толщины (15.33). Если считать, что радиус взаимодействия налетающей частицы много меньше чем размеры ядра, то отсюда получаем

$$F_{n0}(\mathbf{q}) \approx \int \mathrm{d}^2 b\ \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}} \exp\left\{-\frac{\sigma}{2}(1 - i\alpha)T(\mathbf{b})\right\} \times$$
$$\times \langle n| \sum_j f_j(0)\delta(\mathbf{b} - \mathbf{s}_j)|0\rangle \quad . \quad (15.49)$$

Выражения близкие к (15.49) можно получить, отправляясь и не от модели Глаубера — Ситенко, а от метода искаженных волн. В импульсном приближении искаженных волн амплитуда процесса (x, x') вычисляется как интеграл:

$$F_{n0}(\mathbf{q}) =$$
$$= \int \psi^{(-)*}_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\langle n| \sum_j f_j(\mathbf{q})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)|0\rangle \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\mathrm{d}^3 r \ , (15.50)$$

где $f_j(\mathbf{q})$ — амплитуда рассеяния на j-м нуклоне, а

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}} D_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \;\text{ и }\; \psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} D_{\mathbf{k}'}^{(-)}(\mathbf{r}) \quad (15.51)$$

искаженные волны налетающей и рассеянной частиц. В приближении высоких энергий факторы искажения $D_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ и $D_{\mathbf{k}'}^{(-)}(\mathbf{r})$ вычисляются как интеграл по прямолинейной траектории движения частицы до и после неупругого столкновения с одним из нуклонов ядра:

$$D_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \exp\left\{-\frac{i\mu}{\hbar^2 k}\int_0^\infty U_i\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{k}}{k}s\right)\mathrm{d}s\right\}, \quad (15.52)$$

$$D_{\mathbf{k}'}^{(-)}(\mathbf{r}) = D_{\mathbf{k}'}^{(+)*}(\mathbf{r}) = \exp\left\{\frac{i\mu}{\hbar^2 k'}\int_0^\infty U_f^*\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{k}'}{k}s\right)\mathrm{d}s\right\},$$

где $U_i(\mathbf{r})$ и $U_f(\mathbf{r})$ — оптические потенциалы взаимодействия частицы с ядром в начальном и конечном состояниях. Если же $U_i(\mathbf{r})$ и $U_f(\mathbf{r})$ взять в приближении Рэлея (15.44), а также пренебречь искривлением траектории частицы при вычислении фактора искажения, то для (15.50) получим

$$F_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \int \mathrm{d}^2 b\, \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{i\mathbf{q}_\perp\mathbf{b}}\, \mathrm{e}^{iq_z z}\langle \mathrm{n}|\sum_j f_j\, \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j\right)|0\rangle \times$$

$$\times \exp\left\{-\frac{\sigma}{2}(1 - i\alpha)\left[\int_{-\infty}^{z}\rho_i(\mathbf{b}, z')\mathrm{d}z' + \int_z^\infty \rho_f(\mathbf{b}, z')\mathrm{d}z'\right]\right\}, \quad (15.53)$$

где $\rho_i(\mathbf{r})$ и $\rho_f(\mathbf{r})$ — плотности ядра в начальном и конечном состояниях. Наконец, положив здесь $\rho_i(\mathbf{r}) = \rho_f(\mathbf{r})$, получаем

$F_{\mathrm{n}0}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) =$

$$= \int \mathrm{d}^2 b\, \mathrm{d}z\, \mathrm{e}^{i\mathbf{q}_\perp \mathbf{b}}\, \mathrm{e}^{iq_z z} \langle \mathrm{n}| \sum_j f_j(\mathbf{q})\, \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j\right) |0\rangle \mathrm{e}^{-\frac{\sigma}{2}(1-i\alpha)T(\mathbf{b})} =$$

$$= \langle \mathrm{n}| \sum_{j=1}^{A} f_j(\mathbf{q})\, \mathrm{e}^{-\frac{\sigma}{2}(1-i\alpha)T(s_j)} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}_\perp \mathbf{s}_j} \mathrm{e}^{iq_z z} |0\rangle \ . \quad (15.54)$$

Выражение (15.54) отличается от (15.49) фактором $\exp\{iq_z z\}$ содержащим продольную составляющую переданного импульса

$$q_z = (\mathbf{qk})/k \ .$$

Обратимся теперь к квазиупругому некогерентному рассеянию. Для вычисления сечения надо, согласно (15.21) и (15.23), просуммировать вероятности переходов на все возбужденные состояния ядра-мишени:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{incoh}} = \quad (15.55)$$

$$= \sum_{f \neq i} \left| \frac{ik}{2\pi} \int \mathrm{d}^2 b \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}} \langle f| 1 - \prod_{j=1}^{\mathrm{A}} \left[1 - \gamma_j\left(\mathbf{b} - \mathbf{s}_j\right)\right] |i\rangle \right|^2 .$$

Выражение (15.55) написано не совсем точно, так как вектор переданного импульса $\mathbf{q}$ зависит (при фиксированном значении угла рассеяния) от энергии возбуждения ядра ε_f. Однако при больших энергиях налетающих частиц эта зависимость невелика, и мы ею пренебрежем.

Воспользуемся соотношением полноты

$$\sum_f |f\rangle\langle f| = 1 \quad . \quad (15.56)$$

Тогда вся бесконечная сумма сведется к интегралам, куда войдут лишь матричные элементы по основному состоянию ядра

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\text{incoh}} =$$

$$= -\left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \left| \int \mathrm{d}^2 b \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}} \{1 - \langle 0| \prod_{j=1}^{\mathrm{A}} \left[1 - \gamma_j\left(\mathbf{b} - \mathbf{s}_j\right)\right] |0\rangle\} \right|^2 +$$

$$+ \left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \int \mathrm{d}^2 b \, \mathrm{d}^2 b' \mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{b}-\mathbf{b}')} \langle 0| \{1 - \prod_{j=1}^{\mathrm{A}} \left[1 - \gamma_j\left(\mathbf{b} - \mathbf{s}_j\right)\right]\} \times$$

$$\times \{1 - \prod_{j'=1}^{\mathrm{A}} \left[1 - \gamma_{j'}^*\left(\mathbf{b}' - \mathbf{s}_j'\right)\right]\} |0\rangle \,. \quad (15.57)$$

Далее примем приближение факторизованной плотности (15.24) и перейдем к оптическому пределу. В этом случае сечение некогерентного рассеяния дается выражением

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\text{incoh}} = \quad (15.58)$$

$$= \left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}(\mathbf{b}-\mathbf{b}')} \mathrm{e}^{i\left(\chi_{\text{opt}}(\mathbf{b}) - \chi_{\text{opt}}^*(\mathbf{b}')\right)} \left[\mathrm{e}^{\Omega(\mathbf{b},\mathbf{b}')} - 1\right] \mathrm{d}^2 b \, \mathrm{d}^2 b'$$

где $\chi_{\text{opt}}(\mathbf{b})$ — фаза упругого рассеяния (15.42), а $\Omega(\mathbf{b}, \mathbf{b}')$ — новая функция, определенная соотношением

$$\Omega(\mathbf{b}, \mathbf{b}') = \int \gamma(\mathbf{b} - \mathbf{s}) \gamma(\mathbf{b}' - \mathbf{s}') T(\mathbf{s}) d^2 s \,. \quad (15.59)$$

Выражение (15.58) можно упростить дальше, если учесть, что ввиду малости радиуса адрон-нуклонного взаимодействия функция $\Omega(\mathbf{b}, \mathbf{b}')$ отлична от нуля лишь для близких значений аргументов $\mathbf{b}$ и $\mathbf{b}'$:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\text{incoh}} \approx \left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \int \mathrm{e}^{i\mathbf{qb} - \sigma T(\mathbf{B})} \times$$

$$\times \left\{ \exp\left[\frac{T(\mathbf{B})}{k^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}'\mathbf{b}'} |f(\mathbf{q}')|^2 \right] d^2q' - 1 \right\} \mathrm{d}^2b \; \mathrm{d}^2B \quad . (15.60)$$

Если взять параметры нуклон-нуклонного взаимодействия из эксперимента, то величина показателя экспоненты в выражении (15.60) (взятого в квадратные скобки) оказывается заметно меньше единицы. Это позволяет разложить экспоненту в степенной ряд и ограничиться его несколькими первыми членами:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \right)_{\text{incoh}} = |f(\mathbf{q})|^2 \int \mathrm{e}^{-\sigma T(\mathbf{b})} T(\mathbf{b}) \mathrm{d}^2b \; + \cdots =$$

$$= \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \right)_0 N_{\text{eff}}(A) + \cdots \qquad (15.61)$$

Первое слагаемое, пропорциональное элементарному сечению нуклон-нуклонного рассеяния $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_0 = |f(\mathbf{q})|^2$, описывает однократное квазиупругое рассеяние падающей частицы на нуклонах периферического кольцевого слоя, окаймляющего ядро в плоскости, перпендикулярной направлению падающего пучка. Эффективное число нуклонов, участвующих в квазиупругом рассеянии, дается, согласно (15.61), формулой:

$$N_{\text{eff}}(A) = \int \mathrm{e}^{-\sigma T(\mathbf{b})} T(\mathbf{b}) \mathrm{d}^2b \; = \int \mathrm{e}^{-\sigma T(\mathbf{b})} \rho(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3r \; . \quad (15.62)$$

Следующие слагаемые в (15.61) соответствуют двукратному, трехкратному квазиупругому рассеянию и т.д. При малых углах их вклад незначителен по сравнению с вкладом однократного рассеяния, однако они медленнее, чем первое слагаемое, затухают с увеличением угла рассеяния.

§ 15.4. Неупругое рассеяние в пределе очень сильного поглощения

В § 15.1 мы получили дифференциальное сечение упругой дифракции быстрых частиц на сильно поглощающей (абсолютно черной) сфере. Точно такой же результат следует из модели Глаубера—Ситенко (сравним (15.8) и (15.40)). Таким образом, в пределе очень сильного поглощения угловое распределение упруго рассеянных частиц становится нечувствительным к индивидуальным особенностям мишени и описывается универсальной формулой, куда входит лишь параметр размеров мишени:

$$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega = R^2\,[\,\mathrm{J}_1(kR\theta)/\theta\,]^2 \qquad . \qquad (15.63)$$

Сейчас, отправляясь от «микроскопического» подхода, изложенного в предыдущих двух параграфах, мы покажем, что в условиях сильного поглощения дифференциальное сечение неупругой дифракции также нечувствительно к структуре мишени, а угловое распределения неупруго рассеянных частиц определяется лишь мультипольностью перехода и размерами мишени.

Для определенности будем говорить о рассеянии быстрых нейтронов ядром, спин которого в основном состоянии равен нулю. Пусть J — спин конечного состояния ядра, а M — его проекция на направление падающего пучка. Согласно (15.54), в оптическом пределе амплитуда неупругого рассеяния, соответствующая переходу $|0\rangle \to |JM\rangle$, дается выражением

$$F_{JM}(\mathbf{q}) = f_0(\mathbf{q}) \int \mathrm{e}^{i\mathbf{q}_\perp\mathbf{b}}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}_\parallel\mathbf{z}}\mathrm{e}^{-\frac{\sigma}{2}(1+i\alpha)\mathrm{T}(\mathbf{b})} \times$$

$$\times \langle JM| \sum_j \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_j})\,|0\rangle\,\mathrm{d}^2b\,\mathrm{d}z \quad ; \qquad (15.64)$$

здесь мы положили взаимодействие налетающей частицы со всеми нуклонами ядра одинаковым и вынесли

элементарную амплитуду взаимодействия $f_0(\mathbf{q})$ за знак суммы.

Далее будем следовать работе [9]. Выделим в переходной плотности ядра угловую часть:

$$\langle JM| \sum_j \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_j})\,|0\rangle = \rho_J(r)\mathrm{Y}^*_{JM}(\theta,\varphi) \qquad (15.65)$$

и выразим сферическую функцию $\mathrm{Y}_{JM}(\theta,\varphi)$ через присоединенный полином Лежандра:

$$\mathrm{Y}_{JM}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{iM\varphi}\Theta_{JM}(\theta)\ , \qquad (15.66)$$

$$\Theta_{JM}(\theta) = (-1)^M \sqrt{\frac{2J+1}{2}\cdot\frac{(J-M)!}{(J+M)!}}\,\mathrm{P}_J^M\left(\frac{z}{\sqrt{b^2+z^2}}\right). \qquad (15.67)$$

Интегрирование в (15.64) по азимутальному углу вектора **b** дает цилиндрическую функцию Бесселя:

$$\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{e}^{i\mathbf{qb}}\mathrm{e}^{-iM\varphi}\,\mathrm{d}\varphi = i^M\,\mathrm{J}_{|M|}(qb)\ . \qquad (15.68)$$

При интегрировании по z и по b произведение факторов с $\mathrm{e}^{-\frac{\sigma}{2}T(\mathbf{b})}$ и $\rho_J(\sqrt{b^2+z^2})$ сводит область интегрирования к узкому кольцевому поясу радиуса R, который охватывает ядро в экваториальной плоскости, перпендикулярной падающему пучку (т. е. при $z = 0$):

$$F_{JM}(\mathbf{q}) \sim \mathrm{J}_{|M|}(qR)\ \mathrm{P}_J^M(0)\ . \qquad (15.69)$$

Присоединенные полиномы Лежандра при нулевом значении аргумента отличны от нуля, лишь если M — число той же четности, что и J. Подставляя в (15.69) значения $\mathrm{P}_J^M(0)$, окончательно получаем

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_J = \sum_M \left|F_{JM}(\mathbf{q})\right|^2 =$$

$$= \text{const}\,|f(\mathbf{q})|^2 \sum_{M=J,J-2} \frac{(J-M)!\,(J+M)!}{\left[\left(\frac{J-M}{2}\right)!\left(\frac{J+M}{2}\right)!\right]}\left[\mathrm{J}_{|M|}(qR)\right]^2 . \quad (15.70)$$

Эта формула впервые была получена в рамках коллективной модели ядра. Из нее, в частности, следует «правило фаз», касающееся осцилляции дифференциального сечения неупругой дифракции: эти осцилляции в случае переходов нечетной мультипольности находятся в фазе, а при четной мультипольности — в противофазе с осцилляциями сечения упругой дифракции.

§ 15.5. Многоканальная теория дифракционного рассеяния

В условиях применимости эйконального приближения уравнения метода сильной связи можно решать приближенно, обходя трудности разложения по парциальным волнам, связанные с большими значениями орбитального момента частиц.

Подставим в общую систему интегральных уравнений для канальных функций

$$\mathrm{u_n}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}\delta_{\mathrm{n}1} + \\ + \sum_{\mathrm{m}} \int G^{(+)}_{0,\mathrm{n}}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\, V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r}')\mathrm{u_m}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r' \quad , \quad (15.71)$$

приближенное, эйкональное выражение (6.54) для функции Грина свободной частицы в соответствующем канале:

$$G^{(+)}_{0,\mathrm{n}}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') \approx \\ \approx -\frac{i\mu}{\hbar^2 k_{\mathrm{n}}}\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{n}}(z-z')}\delta(\mathbf{b}-\mathbf{b}')\Theta(z-z')\,, \quad (15.72)$$

где $k_{\mathrm{n}} = [2\mu(E-\varepsilon_{\mathrm{n}})]^{1/2}/\hbar$ — импульс частицы в канале n. Тогда при каждом $\mathbf{b}$ мы получаем систему одномерных интегральных уравнений:

$$\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{b},z)=\delta_{\mathrm{n1}}-\frac{i\mu}{\hbar^2 k_{\mathrm{n}}}\times$$

$$\times\sum_{\mathrm{m}=1}^{\mathrm{N}}\int \mathrm{e}^{i(k_{\mathrm{m}}-k_n)z'}\,V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{b},z')\varphi_{\mathrm{m}}(\mathbf{b},z')\,\mathrm{d}z'\ ,$$

$$\mathrm{n},\mathrm{m}=1,2,\dots,\mathrm{N}, \qquad (15.73)$$

где

$$\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{b},z)=\mathrm{e}^{-ik_{\mathrm{n}}z}\mathrm{u}_{\mathrm{n}}(\mathbf{b},z)\ . \qquad (15.74)$$

Система (15.73) эквивалентна системе одномерных дифференциальных уравнений

$$\frac{\partial\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{b},z)}{\partial z}=$$

$$=-\frac{i\mu}{\hbar^2 k_{\mathrm{n}}}\sum_{\mathrm{m}=1}^{\mathrm{N}}\mathrm{e}^{i(k_{\mathrm{m}}-k_{\mathrm{n}})z}\,V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{b},z)\,\varphi_{\mathrm{m}}(\mathbf{b},z) \qquad (15.75)$$

с дополнительным условием

$$\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{b},z)|_{z\to-\infty}=\delta_{\mathrm{n1}}\ .$$

Ее решение дает парциальные амплитуды рассеяния частицы на мишени:

$$F_{\mathrm{n}}(\mathbf{k}_{\mathrm{n}},\mathbf{k})=$$

$$=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}_{\mathrm{n}}\mathbf{r}}\sum_{\mathrm{m}}V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r})\mathrm{u}_{\mathrm{m}}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3r= \qquad (15.76)$$

$$=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\sum_{\mathrm{m}=1}^{\mathrm{N}}\int \mathrm{d}^2b\,\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{b}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i(k_{\mathrm{m}}-k_{\mathrm{n}})z}\,V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{b},z)\varphi_{\mathrm{m}}(\mathbf{b},z)\mathrm{d}z\ ,$$

где $\mathbf{q}=\mathbf{k}_{\mathrm{n}}-\mathbf{k}_1$.

Систему (15.71) для выбранного ограниченного числа каналов $\mathrm{n},\mathrm{m}=1,2,\dots,\mathrm{N}$ можно записать

по-другому, чтобы приближенно учесть влияние всех других каналов:

$$u_n(\mathbf{r}) = \psi^{(+)}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\delta_{n1} + \\ + \sum_{m\neq n} \int G^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\, V_{nm}(\mathbf{r}')u_m(\mathbf{r}')d^3r' \ ; \quad (15.77)$$

здесь $\psi^{(+)}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — искаженная волна частицы, соответствующая оптическому потенциалу взаимодействия с мишенью в n −м канале:

$$V_{opt,n}(\mathbf{r}) = \langle n|\hat{V}(\xi,\mathbf{r})|n\rangle + \Delta V_n(\mathbf{r}) + iW_n(\mathbf{r}). \quad (15.78)$$

Согласно § 11.2, мнимая часть оптического потенциала $W_n(\mathbf{r})$ и члены высшего порядка $\Delta V_n(\mathbf{r})$ в его вещественной части эффективно учитывают связь рассматриваемого канала n со всеми каналами $m \neq 1, \ldots, N$, не учтенными в системе уравнений (15.77). Потенциалу (15.78) соответствует функция Грина $G_n^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$.

При таком подходе амплитуду перехода $|0\rangle \to |n\rangle$, определяемую асимптотикой функции $u_n(\mathbf{r})$, удобно записать как сумму двух слагаемых:

$$F_n(\mathbf{k}'_n,\mathbf{k}) = f_n(\mathbf{k}',\mathbf{k})\delta_{n1} - \\ - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \sum_{m\neq n} \int \psi^{(-)*}_{n,\mathbf{k}'_n}(\mathbf{r})\ V_{nm}(\mathbf{r})u_m(\mathbf{r})\, d^3r \ . \quad (15.79)$$

Первое слагаемое — это амплитуда упругого рассеяния частицы оптическим потенциалом $V_{opt,1}(\mathbf{r})$. Во второе входит искаженная волна $\psi^{(-)}_{n,\mathbf{k}_n}(\mathbf{r})$ соответствующая оптическому потенциалу $V_{opt,n}(\mathbf{r})$ в выходном канале.

При высоких энергиях налетающих частиц функции Грина $G_n^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$, входящие в систему уравнений (15.77), можно заменить соответствующими функциями Грина

свободного движения $G_{0,\mathrm{n}}^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$, взятыми в эйкональном приближении (15.72), а вместе с этим и для искаженной волны $\psi_{\mathrm{n}}^{(+)}(\mathbf{r})$, взять ее приближенное выражение (11.21). Тогда задача (15.77) сводится к решению системы одномерных интегральных уравнений:

$$\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{b},z)=\delta_{\mathrm{n}1}\mathrm{D}_{\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}^{(+)}(\mathbf{b},z)-\frac{i\mu}{\hbar^2 k_{\mathrm{n}}}\sum_{\mathrm{m}\neq\mathrm{n}}\int_{-\infty}^{z}\mathrm{e}^{i(k_{\mathrm{m}}-k_{\mathrm{n}})z'}\times$$

$$\times\,\mathrm{D}_{\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}^{(-)}(\mathbf{b},z')V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{b},z')\varphi_{\mathrm{m}}(\mathbf{b},z')\mathrm{d}z' \quad , \quad (15.80)$$

где по-прежнему функции u_{n} и φ_{n} связаны соотношением (15.74), а $\mathrm{D}_{\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}^{(+)}(\mathbf{b},z)$ и $\mathrm{D}_{\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}^{(-)}(\mathbf{b},z)$ — это факторы искажения, рассчитанные с оптическим потенциалом (15.78):

$$\mathrm{D}_{\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}^{(+)}(\mathbf{b},z)=\exp\left\{-\frac{i\mu}{\hbar^2 k_{\mathrm{n}}}\int_{-\infty}^{z}V_{\mathrm{opt,n}}(\mathbf{b},z')\mathrm{d}z'\right\} \quad , \quad (15.81)$$

$$\mathrm{D}_{\mathbf{k}_{\mathrm{n}}}^{(-)}(\mathbf{b},z)=\exp\left\{-\frac{i\mu}{\hbar^2 k_{\mathrm{n}}}\int_{z}^{\infty}V_{\mathrm{opt,n}}(\mathbf{b},z')\mathrm{d}z'\right\} \quad . \quad (15.82)$$

Упражнения

15.1. Пользуясь дифракционной теорией Глаубера-Ситенко, выразить амплитуду упругого рассеяния π-мезонов ядром ^{6}Li через амплитуды взаимодействия пиона с протоном, нейтроном и ядром ^{4}He. Волновую функцию ядра ^{6}Li взять согласно оболочечной модели. Кулоновским взаимодействием пренебречь.

15.2. Применив оптическую теорему к амплитуде упругого рассеяния (15.38), выразить полное сечение взаимодействия адрона с ядром через функцию толщины $T(\mathbf{b})$ и параметры адрон-нуклонного взаимодействия. При каких

условиях найденная таким образом величина σ_{tot} совпадает с результатом (15.12) модели «черного» ядра?

15.3. Пользуясь дифракционной теорией Глаубера - Ситенко, показать, что полное сечение взаимодействия нейтрона с дейтроном меньше суммы полных сечений nn- и np-взаимодействий:

$$\sigma_{nd} = \sigma_{nn} + \sigma_{np} - \Delta\sigma_{nd}; \quad \Delta\sigma_{nd} > 0 \quad . \qquad (15.83)$$

Показать, что если радиус NN-взаимодействия много меньше размеров дейтрона, а двухчастичные амплитуды f_{nn} и f_{np} чисто мнимы, то «теневая поправка» $\Delta\sigma_{nd}$ вычисляется по формуле

$$\Delta\sigma_{nd} = \frac{\sigma_{nn}\sigma_{np}}{4\pi}\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_d \quad , \qquad (15.84)$$

где $\langle 1/r^2 \rangle_d$ — средний квадрат обратного радиуса дейтрона в основном состоянии.

15.4. Показать, что в приближении слабой связи каналов формулы (15.79), (15.80) многоканальной теории дифракционного рассеяния переходят в формулу (11.25) метода искаженных волн.

Раздел III

ВОПРОСЫ СИММЕТРИИ, УНИТАРНОСТИ И АНАЛИТИЧНОСТИ

Лекция 16. Унитарность S −матрицы. Дисперсионные соотношения. Связь сечений прямых и обратных процессов

§ 16.1. Унитарность S −матрицы и ее следствия

Много важных закономерностей столкновительных процессов можно установить, не задавая ни конкретных свойств взаимодействий, ответственных за столкновение, ни конкретных особенностей структуры сталкивающихся объектов. Закономерности такого рода являются следствием самых общих законов природы, например законов сохранения и тесно связанных с ними общих требований симметрии. Как при рассмотрении вопросов структуры стабильных квантовых систем (см., например, [1, § 57-58]), так и в квантовой теории столкновений симметрийный и динамический подходы применяются обычно в тесной связи между собой, дополняя и усиливая возможности друг друга.

Унитарность S-матрицы (S-оператора):

$$\widehat{S}\,\widehat{S}^{+} = 1 \qquad (16.1)$$

является важнейшим общим требованием последовательной квантовой теории. В лекции 7 мы доказали это соотношение для случая рассеяния частицы на заданном потенциале. Обобщим его на многоканальный случай.

Пусть ψ_{in} — волновая функция начального (входного) состояния рассматриваемой физической системы, которая состоит из двух подсистем, не взаимодействующих друг с другом на больших относительных расстояниях. $S-$ оператор переводит ее в волновую функцию выходного состояния:

$$\psi_{\text{out}} = \hat{S}\psi_{\text{in}} \qquad (16.2)$$

и, подобно (7.32), выражается через мёллеровские операторы $\hat{\Omega}_-$ и $\hat{\Omega}_+$, которые в свою очередь связаны предельным соотношением (7.30) с полным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ и с гамильтонианом невзаимодействующих подсистем $\hat{H}_0$.

Пусть векторы $|a>$ образуют некоторый полный набор состояний невзаимодействующих подсистем. Тогда, очевидно, матричный элемент $<b|\hat{S}|a>$ есть амплитуда вероятности того, что рассматриваемая физическая система, находившаяся при $t \to -\infty$ в состоянии $|a>$, окажется в результате процесса столкновения в состоянии $|\mathrm{b}>$, а величина

$$P_{ba} = |<b|\hat{S}|a>|^2 \qquad (16.3)$$

это вероятность такого процесса. Записывая соотношение унитарности (16.1) в явном матричном виде:

$$\sum_b <a|\hat{S}^+|b><b|\hat{S}|a'> = \delta_{aa'} \quad , \qquad (16.4)$$

получаем отсюда при $a = a'$

$$\sum_b |<b|\hat{S}|a>|^2 = 1 \quad , \qquad (16.5)$$

т.е.

$$\sum_b \mathrm{P}_{ba} = 1 \quad . \qquad (16.6)$$

Таким образом, физический смысл требования унитарности — это нормировка на 100% суммарной вероятности того, что в процессе столкновения система окажется в одном из состояний полного набора $|b>$.

При $b \neq a$ величина $\mathrm{P}_{ba} = |<b|\hat{S}|a>|^2$ есть вероятность перехода $|a> \to |b>$. Если же взаимодействие между

подсистемами отсутствует, то, согласно (16.2), S −оператор сводится к единичному оператору:

$$\hat{S} = \hat{I} \quad . \tag{16.7}$$

Поэтому для описания эффекта упругого рассеяния $|a> \rightarrow |a>$ надо использовать оператор $\hat{S} - \hat{I}$ и, следовательно, вероятность упругого рассеяния дается формулой

$$\mathrm{P}_{aa} = |< a|\hat{S} - \hat{I}|a >|^2 \quad . \tag{16.8}$$

Ввиду ортогональности состояний полного набора $\langle b|a\rangle = \delta_{ab}$ формулу (16.8) можно записать и в общем случае:

$$\mathrm{P}_{ba} = |< b|\hat{S} - \hat{I}|a >|^2 \tag{16.9}$$

Далее рассмотрим, для простоты, столкновение бесспиновых частиц. В этом случае орбитальный момент ℓ относительного движения сталкивающихся частиц сохраняется, и полное сечение столкновения есть сумма полных сечений столкновения для частиц с разными ℓ. Так, в задаче потенциального рассеяния мы имеем (соотношения (3.27) и (7.76))

$$\sigma = \sum_{\ell} \sigma_{\ell}\,; \quad \sigma_{\ell} = \frac{\pi}{k^2}(2\ell + 1)|S_{\ell} - 1|^2 \quad , \tag{16.10}$$

где параметры S_{ℓ} определяются фазами соответствующих волн:

$$S_{\ell} = \mathrm{e}^{2i\delta_{\ell}} \quad ; \tag{16.11}$$

k — это импульс падающей частицы.

Обобщим, учитывая соотношение (16.9), формулу (16.10) на многоканальный случай:

$$\sigma_{ba} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell}(2\ell + 1)|< b|\hat{S}^{\ell}|a > - \delta_{ba}|^2 \quad . \tag{16.12}$$

В частности, для сечения упругого рассеяния в многоканальном случае получаем:

$$\sigma_{\text{elas}} = \sigma_{aa} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell}(2\ell+1)|S_\ell - 1|^2 \quad ; \qquad (16.13)$$

здесь мы ввели обозначение:

$$< a|\hat{S}^\ell|a > \equiv S_\ell \quad . \qquad (16.14)$$

Для сечения неупругого столкновения (т.е. неупругого рассеяния или реакции с перераспределением частиц) из (16.12) получаем

$$\sigma_{ba} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell}(2\ell+1)|< b|\hat{S}^\ell|a >|^2 \quad ; b \neq a \quad . \qquad (16.15)$$

Часто приходится иметь дело с суммарным сечением всех неупругих процессов (его называют сечением реакций). Учитывая следствие (16.5) соотношения унитарности, мы можем выразить сечение реакций через диагональные элементы матрицы рассеяния:

$$\sigma_r = \sum_{b\neq a}\sigma_{ba} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell}(2\ell+1)\sum_{b\neq a}|< b|\hat{S}^\ell|a >|^2 =$$

$$= \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell}(2\ell+1)\,(1-|S_\ell|^2) \quad . \qquad (16.16)$$

Отсюда видно, что сечение реакции обращается в ноль, если все диагональные элементы S −матрицы равны по модулю единице:

$$|S_\ell| = 1 \quad . \qquad (16.17)$$

Это условие эквивалентно известному в теории потенциального рассеяния условию вещественности фаз. Если же какие-то неупругие процессы разрешены, т.е. $\sigma_r \neq 0$, то, по крайней мере, для некоторых ℓ имеет место неравенство:

$$|S_\ell| < 1 \quad . \qquad (16.18)$$

Если соотношение (16.11), введенное в теории потенциального рассеяния, использовать и в многоканальной теории в качестве соотношения, связывающего элементы $S-$ матрицы с фазами рассеяния, то условию (16.18) будут соответствовать комплексные значения фаз δ_ℓ, причем их мнимая часть всегда положительна: $\mathrm{Im}\delta_\ell > 0$ Выразим также через $S-$матрицу амплитуду упругого рассеяния:

$$f_{\text{elas}}(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)(S_\ell - 1)\,\mathrm{P}_\ell(\cos\theta) \quad . \qquad (16.19)$$

Легко видеть, что соотношения (16.13), (16.16) и (16.19) согласуются с оптической теоремой (3.28).

Итак, соотношение унитарности (16.1) позволяет выразить полное сечение всех неупругих процессов через параметры упругого рассеяния. Рассматривая внимательно выражения (16.13) и (16.16), можно сформулировать и нетривиальное качественное положение, относящееся к вопросу о соотношении упругих и неупругих процессов: невозможна ситуация, когда в результате столкновения происходят только неупругие процессы, не сопровождаемые упругим рассеянием. Действительно, сечение σ_{elas} обращается в нуль, только если все S_ℓ равны единице, но тогда и $\sigma_r = 0$.

Разнообразные физические примеры из ядерной и атомной физики показывают, что требование унитарности $S-$матрицы играет в теории исключительно важную роль. Очень часто обеспечение унитарности $S-$ матрицы при выполнении приближённых расчетов резко улучшает качество совпадения теории с экспериментом. В связи с этим разработаны и продолжают разрабатываться специальные приемы «унитаризации» теории. Одним из них

является использование так называемой K-матрицы, или K-оператора.

Связь $K-$ оператора и $S-$ оператора определяется соотношением:

$$\widehat{S} = \frac{1 - \frac{i}{2}\widehat{K}}{1 + \frac{i}{2}\widehat{K}} \quad , \tag{16.20}$$

при этом на $\widehat{K}-$ оператор наложено требование эрмитовости:

$$\widehat{K}^{+} = \widehat{K} \quad . \tag{16.21}$$

Тогда любое приближенное выражение для $\widehat{K}$-оператора автоматически дает унитарную S-матрицу.

В качестве примера использования условия унитарности рассмотрим вопрос о так называемых **пороговых явлениях**. Пусть a обозначает упругий, а b — неупругий канал при столкновении частицы x с мишенью A. Обозначим величиной $E_{\text{thres}} = \varepsilon_b - \varepsilon_a$ значение энергии частицы x, при котором открывается канал b. Оказывается, что в окрестности $E \approx E_{\text{thres}}$, сечение упругого рассеяния σ_{aa} обнаруживает характерные особенности, как бы «откликаясь» на открывающийся при $E = E_{\text{thres}}$, неупругий канал.

$S-$матрица рассматриваемой системы имеет вид

$$\widehat{S}(E) = \begin{pmatrix} S_{aa} & S_{ab} \\ S_{ba} & S_{bb} \end{pmatrix} \quad . \tag{16.22}$$

В области ниже порога происходит только упругое рассеяние; здесь из всех элементов $S-$матрицы (16.22) отличен от нуля лишь один — S_{aa}, и для него выполняется условие

$$|S_{aa}| = 1; \quad E < E_{\text{thres}} \quad . \tag{16.23}$$

В области выше порога соотношение унитарности (16.4) даёт связь между элементами S −матрицы:

$$|S_{aa}|^2 + |S_{ab}|^2 = 1 \quad . \tag{16.24}$$

Положим ради простоты, что орбитальный момент ℓ частицы x в обоих каналах a и b равен нулю, а между подсистемами x и A нет кулоновского взаимодействия. Тогда сечения упругого и неупругого рассеяний выражаются формулами:

$$\sigma_{aa}(E) = \frac{\pi}{k_a^2}|S_{aa}(E) - 1|^2 \quad ; \tag{16.25}$$

$$\sigma_{ba}(E) = \frac{\pi}{k_a^2}|S_{ba}(E)|^2 \quad , \tag{16.26}$$

где $k_a = \sqrt{2\mu E}$ — импульс частицы в упругом канале. Вблизи порога E_{thres} энергетическая зависимость сечения неупругого рассеяния $\sigma_{ba}(E)$ определяется прежде всего его зависимостью от быстро меняющегося импульса частицы в неупругом канале: $k_b = (2\mu(E - E_{\text{thres}}))^{1/2}$. Для того чтобы выяснить, как зависит $S_{ba}(E)$ от k_b, воспользуемся снова соотношением унитарности (16.4) и свяжем с его помощью матричные элементы S_{bb} и S_{ba}

$$|S_{bb}|^2 + |S_{ba}|^2 = 1 \quad . \tag{16.27}$$

Входящий сюда элемент S матрицы S_{bb} определяет упругое рассеяние частицы x в канале b, т.е. процесс ее упругого столкновения с возбужденной мишенью A^*:

$$\sigma_{bb}(E) = \frac{\pi}{k_b^2}|S_{bb}(E) - 1|^2 \quad . \tag{16.28}$$

Фаза рассеяния в канале b, определенная общим соотношением (16.11), ведет себя при $k_b \to 0$ согласно закону:

$$\delta_\ell^{(b)}(E)\Big|_{E\to E_{\text{thres}}} \sim k^{2\ell+1} \quad . \qquad (16.29)$$

С учетом сделанного предположения, что $\ell = 0$, отсюда получаем

$$\sigma_{bb}(E)|_{E\to E_{\text{thres}}} \sim \frac{1}{k_b} \quad . \qquad (16.30)$$

Это хорошо известный в ядерной физике «закон $1/v$», показывающий, что сечение экзотермической реакции при взаимодействии нейтральной частицы с ядром ведет себя вблизи порога обратно пропорционально скорости (импульсу) падающей частицы. Нам, однако, нужен сейчас не сам этот закон, а формула околопорогового поведения элемента S −матрицы в неупругом канале b, из которой этот закон вытекает

$$[S_{bb}(E) - 1]|_{E\to E_{\text{thres}}} \sim k_b \quad . \qquad (16.31)$$

Комбинируя вместе соотношения (16.24), (16.27) и (16.31), получаем, что вблизи порога при $E > E_{\text{thres}}$ элемент $S-$ матрицы $S_{aa}(E)$, определяющий сечение упругого рассеяния в канале a, зависит от k_b согласно закону:

$$[|S_{aa}(E)| - 1]|_{E\to E_{\text{thres}}} \sim k_b \quad . \qquad (16.32)$$

Итак, для одной и той же величины $|S_{aa}(E)|$ мы имеем в окрестности $E \approx E_{\text{thres}}$ два выражения: (16.23) — ниже порога, (16.32) — выше порога. Считая, что элементы S-матрицы являются аналитическими функциями энергии (см. § 16.2), объединим эти два выражения общей формулой:

$$S_{aa}(E) = \mathrm{e}^{2i\delta_0^{(a)}}\left(1 - \alpha\sqrt{E - E_{\text{thres}}}\right) , \qquad (16.33)$$

где $\delta_0^{(a)}$ — вещественная фаза, плавно меняющаяся в окрестности $E \approx E_{\text{thres}}$. Действительно, в узкой окрестности вблизи порога при $E > E_{\text{thres}}$ формула (16.33) непосред-

ственно дает (16.32). Что касается области $E < E_{\text{thres}}$, то здесь второе слагаемое в (16.39) мнимо, и, следовательно, отклонение величины $|S_{aa}(E)|$ от единицы пропорционально уже не k_b, а $k_b^2{}'$, таким отклонением, как эффектом более высокого порядка, мы пренебрежем.

Подставим теперь полученное выражение $S_{aa}(E)$ в формулу (16.25) для сечения упругого рассеяния:

$$\sigma_{aa}(E)|_{E\to E_{\text{thres}}} =$$

$$\begin{cases} \sigma_{aa}^{(0)}(E)\left[1-\alpha\sqrt{E-E_{\text{thres}}}\right], & \text{если } E > E_{\text{thres}}; \\ \sigma_{aa}^{(0)}(E)\left[1+\alpha\,\text{ctg}\left(\delta_0^{(a)}\right)\sqrt{E_{\text{thres}}-E}\right], & \text{если } E < E_{\text{thres}}, \end{cases} \tag{16.34}$$

где

$$\sigma_{aa}^{(0)} = \frac{\pi}{k_a^2}\left|e^{2i\delta_0^{(a)}}-1\right|^2 \quad .$$

Отсюда видно, что если фаза $\delta_0^{(a)}$ заключена в интервале $\pi/2 < \delta_0^{(a)} < \pi$ (т.е. $\text{ctg}(\delta_0^{(a)})$ отрицателен), то сечение упругого рассеяния $\sigma_{aa}(E)$ имеет в точке $E = E_{\text{thres}}$ острый пик. Если фаза заключена в интервале $0 < \delta_0^{(a)} < \pi/2$, то кривая $\sigma_{aa}(E)$ в точке $E = E_{\text{thres}}$ претерпевает излом. Это и есть так называемые **пороговые особенности** в сечении упругого рассеяния.

§ 16.2. Дисперсионные соотношения

В предыдущем параграфе мы воспользовались свойством аналитичности $S-$матрицы, рассматриваемой в качестве функции энергии (импульса) частицы в комплексной области изменения этих переменных. Требование аналитичности, предъявляемое к элементам $S-$матрицы, амплитуде рассеяния, $t-$матрице, относится к числу фундаментальных положений теории. Существует тесная связь между требованием аналитичности и одним из

самых общих физических принципов — принципом причинности (см., например, [14]). Используя требование аналитичности, оказывается возможным записать для амплитуды рассеяния, элементов S −матрицы и т.п. особого рода интегральные соотношения — так называемые **дисперсионные соотношения**, играющие в современной квантовой теории очень важную роль.

Разберем их смысл на примере дисперсионных соотношений для амплитуды упругого рассеяния вперед. Амплитуда $f(k,\theta=0)\equiv f(k,0)$ связана с $S-$ матрицей соотношением

$$f(k,0)=\frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)(S_\ell(k)-1)\ . \qquad (16.36)$$

Особенности $S-$ матрицы как функции энергии $S(E)$ в комплексной плоскости E нам известны (см. § 6.4 и 12.3): это полюса на отрицательной вещественной полуоси:

$$E=E_1,E_2,\dots,E_N\ , \qquad (16.37)$$

соответствующие связанным состояниям системы, и полюса в 4-м квадранте плоскости E , соответствующие квазистационарным состояниям системы (резонансам). Отсюда следует, что во всей верхней полуплоскости комплексной переменной $k=\sqrt{2\mu E}$ особенностями $S-$ матрицы и амплитуды рассеяния (16.36) являются полюса, расположенные на мнимой оси:

$$k_{\rm n}=ix_n\ ;\quad x_{\rm n}=\sqrt{2\mu|E_{\rm n}|}\ ;\ {\rm n}=1,\dots,N, \qquad (16.38)$$

и отвечающие связанным состояниям (16.37). Рассмотрим интеграл

$$\frac{1}{2\pi i}\int_C\frac{f(k',0)-f(\infty,0)}{k'-k}{\rm d}k'\quad , \qquad (16.39)$$

где контур C составим из вещественной оси и дуги большого круга в верхней полуплоскости. Вычитание амплитуды $f(\infty,0)$ (совпадающей с борновской амплитудой рассеяния вперед) обеспечивает сходимость интеграла при больших k'.

Если точка k лежит в верхней полуплоскости, то по теореме Коши получаем

$$\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{f(k',0)-f(\infty,0)}{k'-k}\,\mathrm{d}k' = f(k,0)-f(\infty,0)+$$

$$+\sum_{\mathrm{n}}\frac{ir_{\mathrm{n}}}{x_{\mathrm{n}}(k-ix_{\mathrm{n}})}, \qquad (16.40)$$

где последнее слагаемое есть сумма по всем связанным состояниям системы; параметры r_{n} пропорциональны вычетам S −матрицы в полюсах (16.38). Если точку k устремить на вещественную ось, соотношение (16.40) несколько изменяется:

$$\frac{1}{\pi i}\mathcal{P}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{f\left(k',0\right)-f(\infty,0)}{k'-k}\,\mathrm{d}k' = f(k,0)-f(\infty,0)+$$

$$+\sum_{\mathrm{n}}\frac{ir_{\mathrm{n}}}{x_{\mathrm{n}}(k-ix_{\mathrm{n}})}\quad , \qquad (16.41)$$

где знак $\mathcal{P}$ соответствует интегралу в смысле главного значения.

Запишем (16.41) отдельно для вещественной и мнимой частей амплитуды рассеяния вперед:

$$\mathrm{Re}f(k,0) = f(\infty,0)+$$

$$+\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Im}f(k',0)}{k'-k}\mathrm{d}k'+\sum_{\mathrm{n}}\frac{r_{\mathrm{n}}}{k^2+x_{\mathrm{n}}^2}\quad;\quad(16.42)$$

$$\mathrm{Im}f(k,0)=-\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Re}f(k',0)-f(\infty,0)}{k'-k}\mathrm{d}k'-$$

$$-\sum_{n}\frac{k}{x_{\mathrm{n}}}\frac{r_{\mathrm{n}}}{k^2-x_{\mathrm{n}}^2}\quad.\quad(16.43)$$

Оптическая теорема позволяет вычислить мнимую часть амплитуды рассеяния вперед через полное сечение взаимодействия:

$$\mathrm{Im}f(k,0)=(k/4\pi)\sigma_{\mathrm{tot}}(k)\quad.\qquad(16.44)$$

Дисперсионное соотношение (16.42) позволяет сделать то же для вещественной части:

$$\mathrm{Re}f(k,0)=f(\infty,0)+\frac{1}{4\pi^2}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k'\sigma_{\mathrm{tot}}(k')}{k'-k}\mathrm{d}k'+$$

$$+\sum_{\mathrm{n}}\frac{r_{\mathrm{n}}}{k^2-x_{\mathrm{n}}^2}.\quad(16.45)$$

Правда, сюда входят также вычеты $S-$матрицы в полюсах, отвечающих связанным состояниям системы. Можно, однако, показать, что все они связаны с такими физическими характеристиками этих состояний, которые в принципе можно измерить (см. упр. 16.2).

§ 16.3. Обращение времени. Связь сечений прямого и обратного процессов при столкновении

Начнем с частного случая: рассмотрим процесс неупругого рассеяния частицы $x+A\to x'+A^*$. Если воспользоваться методом искаженных волн, то

дифференциальное сечение парциального перехода $|0\rangle \to |\mathrm{n}\rangle$ можно вычислить по формуле (11.9). Перепишем ее, слегка изменив обозначения. Пусть индекс a относится к каналу, где мишень A находится в основном, а индекс b — в возбужденном состоянии:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{ba}}{\mathrm{d}\Omega_a} =$$

$$= \frac{k_b}{k_a}\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \psi_{\mathbf{k}_b}^{(-)*}(\mathbf{r})\langle b|\hat{V}(\xi,\mathbf{r})|a\rangle\psi_{\mathbf{k}_a}^{(+)}(\mathbf{r})\mathrm{d}^3r\right|^2. \quad (16.46)$$

Формула (16.46) дает вероятность такого процесса неупругого рассеяния, когда падающая частица имеет импульс $\mathbf{k}_a$, рассеянная — импульс $\mathbf{k}_b$, а мишень A переходит из состояния $|a\rangle$ в состояние $|b\rangle$. Рассмотрим теперь процесс, обратный по времени: пусть частица импульсом $(-\mathbf{k}_b)$ (направленным противоположно импульсу $\mathbf{k}_b$) падает на мишень, находящуюся в состоянии $|b\rangle$, так что в результате столкновения мы имеем мишень в состоянии $|a\rangle$, а рассеянную частицу — с импульсом $(-\mathbf{k}_a)$. Дифференциальное сечение такого обратного процесса дается (если по-прежнему пользоваться методом искаженных волн) все той же формулой (11.9). А именно:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{ab}}{\mathrm{d}\Omega_a} =$$

$$= \frac{k_a}{k_b}\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \psi_{-\mathbf{k}_a}^{(-)*}(\mathbf{r})\langle a|\hat{V}(\xi,\mathbf{r})|b\rangle\psi_{-\mathbf{k}_b}^{(+)}(\mathbf{r})d^3r\right|^2. \quad (16.47)$$

Как связаны между собой вероятности прямого и обратного процессов?

Вспомним, что функции $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\psi^{(-)}(\mathbf{r})$ удовлетворяют соотношению

$$\left[\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\right]^{*} = \psi_{-\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) \quad . \qquad (16.48)$$

Используя его, запишем входящий в (16.47) интеграл по-другому:

$$\int \psi_{-\mathbf{k}_a}^{(-)*}(\mathbf{r})\,\langle a|\hat{V}(\xi,\mathbf{r})|b\rangle\,\psi_{-\mathbf{k}_b}^{(+)}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3r =$$

$$= \int \psi_{\mathbf{k}_b}^{(-)*}(\mathbf{r})\,\langle a|\hat{V}(\xi,\mathbf{r})|b\rangle\,\psi_{\mathbf{k}_a}^{(+)}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3r =$$

$$= \int \psi_{\mathbf{k}_b}^{(-)*}(\mathbf{r})\,\langle b|\hat{V}(\xi,\mathbf{r})|a\rangle^{*}\,\psi_{\mathbf{k}_a}^{(+)}(\mathbf{r})\mathrm{d}^3r \qquad (16.49)$$

(последнее равенство получено с учетом эрмитовости оператора $\hat{V}(\xi,\mathbf{r})$). Хотя выражения (16.49) и очень близки, но не совпадают с интегралом, входящим в (16.46). Таким образом, между величиной сечений процессов $a \to b$ и $b \to a$ в общем случае нет какого-либо простого соотношения. Однако если состояния мишени $|a\rangle$ и $|b\rangle$ описываются вещественными волновыми функциями (конечно, какой-либо постоянный общий фазовый множитель при этом несуществен), то интеграл (16.49) и интеграл, входящий в (16.46) совпадают другом с другом. В этом случае сечения процессов связаны между собой простым соотношением

$$k_a^2 \frac{\mathrm{d}\sigma_{ba}}{\mathrm{d}\Omega_b} = k_b^2 \frac{\mathrm{d}\sigma_{ab}}{\mathrm{d}\Omega_a} \quad . \qquad (16.50)$$

Условие вещественности волновых функций состояний $|a\rangle$ и $|b\rangle$ выполняется, например, в случае, когда угловые моменты обоих состояний равны нулю:

$$J_a = J_b = 0 \quad , \qquad (16.51)$$

или когда хотя бы проекции этих моментов равны нулю:

$$M_a = M_b = 0 \ . \qquad (16.52)$$

Мы начали с частного случая, выбрав конкретный тип столкновения и конкретный приближенный метод его описания. Возьмем от полученного здесь результата указание на то, что вопрос о существовании соотношения, связывающего между собой сечения прямого и обратного процессов, каким-то образом связан с вопросом об угловых моментах (спинах) сталкивающихся подсистем. И поэтому, переходя к общему рассмотрению, наделим и сталкивающиеся и образующиеся в процессе столкновения частицы спинами. Учтем (подробнее см., например, в [1, § 58]), что при обращении времени ($t \to -t$) проекции всех угловых моментов (спинов) меняют знак:

$$\mathbf{s}|_{t\to -t} = -\mathbf{s}. \qquad (16.53)$$

Рассмотрим столкновение частиц 1 и 2 с образованием частиц 3 и 4:

$$1 + 2 \to 3 + 4 \quad , \qquad (16.54)$$

а также процесс

$$3 + 4 \to 1 + 2 \quad , \qquad (16.55)$$

который является обратным по отношению к (16.54). В качестве физических величин, задающих состояние, возьмем импульс $\mathbf{k}$ относительного движения двух частиц и проекции спинов частиц на ось z. Тогда амплитуду процесса (16.54) можно представить в виде

$$f(a \to b) \sim \frac{1}{k_a} \left\langle \mathbf{k}_b, \mathrm{m}_3, \mathrm{m}_4 \middle| \hat{S} - \hat{I} \middle| \mathbf{k}_a, \mathrm{m}_1, \mathrm{m}_2 \right\rangle \quad , \qquad (16.56)$$

где индекс a относится к паре частиц $(1 + 2)$, а индекс b — к паре частиц (3+4). Соответственно для амплитуды обратной реакции (16.55) имеем

$$f(b \to a) \sim \frac{1}{k_b} \left\langle -\mathbf{k}_a, \mathrm{m}_1, \mathrm{m}_2 \middle| \hat{S} - \hat{I} \middle| -\mathbf{k}_b, \mathrm{m}_3, \mathrm{m}_4 \right\rangle \ , \quad (16.57)$$

Как известно, уравнения движения консервативной системы в классической механике инвариантны относительно изменения знака времени. Отсюда вытекает исключительно важное свойство движения: если система при увеличении времени t проходит некоторую последовательность состояний, то для этой системы возможно и обращенное движение, когда при увеличении t она проходит эти же состояния в обратной последовательности с противоположным направлением импульса и момента импульса. Аналогичный принцип обратимости движения имеет место и в квантовой механике. Из него вытекает важное соотношение для амплитуд вероятностей прямого и обратного процессов:

$$\left\langle \mathbf{k}_b, \mathrm{m}_3, \mathrm{m}_4 \middle| \hat{S} \middle| \mathbf{k}_a, \mathrm{m}_1, \mathrm{m}_2 \right\rangle = \\ = \left\langle -\mathbf{k}_a, -\mathrm{m}_1, -\mathrm{m}_2 \middle| \hat{S} \middle| -\mathbf{k}_b, -\mathrm{m}_3, -\mathrm{m}_4 \right\rangle \ , \quad (16.58)$$

которое называется **теоремой взаимности**. Эта теорема устанавливает связь между прямым процессом и таким процессом, который отличается от обратного противоположном знаком проекций спинов. Следовательно, теорема взаимности, вообще говоря, не позволяет связать друг с другом амплитуды прямой (16.56) и обратной (16.57) реакций. Однако можно установить связь между дифференциальными сечениями этих реакций, усредненными по проекциям спинов в начальном состоянии и просуммированными по проекциям спинов в конечном состоянии (именно также сечения измеряются в случае, когда сталкивающиеся частицы не поляризованы, а детекторы не чувствительны к поляризации регистрируемых частиц). Согласно (16.56) и (16.57), для этих усредненных сечений имеем

$$\overline{\frac{\mathrm{d}\sigma_{ba}}{\mathrm{d}\Omega_b}} \sim \frac{1}{k_a^2} \frac{1}{(2s_1+1)(2s_2+1)} \times$$

$$\times \sum_{\substack{\mathrm{m}_1\mathrm{m}_2 \\ \mathrm{m}_3\mathrm{m}_4}} |\langle \mathbf{k}_b, \mathrm{m}_3, \mathrm{m}_4 | \hat{S} - \hat{I} | \mathbf{k}_a, \mathrm{m}_1, \mathrm{m}_2 \rangle|^2 \ ; \quad (16.59)$$

$$\overline{\frac{\mathrm{d}\sigma_{ab}}{\mathrm{d}\Omega_a}} \sim \frac{1}{k_b^2} \frac{1}{(2s_3+1)(2s_4+1)} \times$$

$$\times \sum_{\substack{\mathrm{m}_1\mathrm{m}_2 \\ \mathrm{m}_3\mathrm{m}_4}} |\langle -\mathbf{k}_a, \mathrm{m}_1, \mathrm{m}_2 | \hat{S} - \hat{I} | -\mathbf{k}_b, \mathrm{m}_3, \mathrm{m}_4 \rangle|^2 \ , \quad (16.60)$$

где s_i — спины частиц. Исключая с помощью теоремы взаимности (16.58) входящие в (16.59) и (16.60) матричные элементы S −матрицы, получаем

$$k_a^2(2s_1+1)(2s_2+1)\overline{\frac{\mathrm{d}\sigma_{ba}}{\mathrm{d}\Omega_b}} =$$

$$= k_b^2(2s_3+1)(2s_4+1)\overline{\frac{\mathrm{d}\sigma_{ab}}{\mathrm{d}\Omega_a}} \ . \quad (16.61)$$

Если спины всех частиц равны нулю, отсюда следует соотношение (16.50).

Соотношение (16.50) называется соотношением **детального баланса**. Оно играет фундаментальную роль в физике, поскольку устанавливает связь между вероятностями прямых и обратных процессов. Иногда и соотношение (16.61) называют соотношением детального баланса, но надо помнить, что оно устанавливает связь только между усредненными дифференциальными сечениями этих процессов.

Упражнения

16.1. Показать, что если неупругий канал связан с разлетом заряженных частиц, то пороговые особенности в сечении упругого рассеяния, описываемые выражением (16.34) сглаживаются.

16.2. При взаимодействии частиц высокой энергии с ядрами ($kR \gg 1$) орбитальный момент частицы ℓ и прицельный параметр **b** связаны между собой соотношением классической механики: ($\ell = kb$) . Заменяя $S-$матрицу (16.11) $S-$матрицей, зависящей от b, параметризуя ее согласно модели «черной» сферы (15.4):

$$S(b) = \begin{cases} 0, & b \le R, \\ 1, & b > R, \end{cases} \qquad (16.62)$$

и переходя в формулах (16.13) и (16.16) от суммирования по ℓ к интегрированию по b, получить результаты (15.11) — (15.13):

$$\sigma_{\text{elas}} = \sigma_2 = \pi R^2 \ . \qquad (16.63)$$

16.3. В условиях предыдущего упражнения вычислить амплитуду упругого рассеяния частицы. Воспользоваться предельным соотношением для полиномов Лежандра:

$$\mathrm{P}_\ell(\cos\theta)|_{\theta \ll 1} \approx \mathrm{J}_0(\ell\theta) \ , \qquad (16.64)$$

где $\mathrm{J}_0(x)$— функция Бесселя нулевого порядка. Сравнить полученный результат с (15.8).

16.4. Используя результат упражнения (6.5), показать, что вычет $S-$матрицы r_r в полюсе E_{n} связан с амплитудой асимптотики («хвоста») волновой функции соответствующего связанного состояния:

$$\varphi_{E_{\text{n}}}(r)|_{r\to\infty} = \text{const}\,\frac{\mathrm{e}^{-x_{\text{n}}r}}{r} \quad . \qquad (16.65)$$

16.5. Раскрыть смысл соотношения (16.48) с точки зрения операции обращения времени.
16.6. Рассмотреть результат упражнения (7.1) с точки зрения вопроса о соотношении вероятностей прямых и обратных процессов.

Лекция 17. Эффекты взаимодействий, зависящих от спина. Тождественность частиц

§ 17.1. Инвариантные свойства амплитуды рассеяния частиц со спином. Поляризация частиц при рассеянии

В этом параграфе будет показано, что анализ свойств симметрии взаимодействия позволяет получить общий вид амплитуды рассеяния и установить целый ряд важных особенностей процесса рассеяния. В частности, явление поляризации частиц при рассеянии находит достаточно полное объяснение в рамках теоретического рассмотрения, опирающегося на анализ одних лишь свойств инвариантности амплитуды рассеяния. Для простоты ограничимся случаем, когда налетающая частица имеет спин $s = 1/2$, а частица-мишень спином не обладает.

Предположим, что до рассеяния налетающая частица находилась в состоянии χ_{sm} с определенным значением m проекции спина на ось z. Стационарная задача потенциального рассеяния частицы со спином состоит в решении стационарного уравнения Шредингера с дополнительным условием

$$\psi(\mathbf{r})\Big|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}\chi_{sm} + (\text{расходящаяся волна}). \quad (17.1)$$

где $\psi(\mathbf{r})$, как и χ_{sm} — столбец из $(2s+1)$ элементов. Повторяя выкладки § 1.1, получим для асимптотики волновой функции, удовлетворяющей этому граничному условию, выражение

$$\psi^{(+)}_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\Big|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}\chi_{sm} + f_m(\mathbf{k}',\mathbf{k})\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}. \quad (17.2)$$

где $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$. Интеграл

$$f_m(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\ \hat{V}(\mathbf{r})\ \psi^{(+)}_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \mathrm{d}^3 r \qquad (17.3)$$

есть амплитуда расходящейся волны, которая теперь зависит не только от энергии падающей частицы и угла рассеяния, но и от спиновой переменной, и играет роль спиновой функции рассеянной частицы.

Формулу (17.2) удобно записать еще и по-другому:

$$\psi^{(+)}_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\ \Big|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\chi_{sm} + \hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k})\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\chi_{sm}\ , \quad (17.4)$$

где оператор $\hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, будем называть **оператором амплитуды рассеяния.** Для нахождения его явного вида надо решить задачу рассеяния на потенциале $\hat{V}(\mathbf{r})$, который представляет собой оператор, действующий не только в пространственном (импульсном), но и в спиновом пространстве частицы.

Решение такой задачи рассеяния в общем случае представляет собой сложную проблему. Однако некоторые важные данные о структуре оператора $\hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ можно получить путем анализа свойств симметрии взаимодействия, поскольку амплитуду процесса столкновения можно представить в виде матричного элемента оператора рассеяния $\hat{S}$:

$$\left\langle m' \middle| \hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \middle| m \right\rangle \sim (1/k) \left\langle m', \mathbf{k}' \middle| \hat{S} - \hat{I} \middle| m, \mathbf{k} \right\rangle\ , \quad (17.5)$$

а свойства симметрии S −матрицы совпадают со свойствами симметрии гамильтониана системы $\hat{H}$. Гамильтониан системы, состоящий из подсистем, связанных сильным или электромагнитным взаимодействием, инвариантен относительно произвольных поворотов $\hat{R}$ и пространственной инверсии $\hat{P}$. Следовательно, и оператор амплитуды должен быть инвариантен относительно этих преобразований.

Опираясь на эти фундаментальные свойства оператора $\hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, найдем его общий вид. Ограничимся случаем $s = 1/2$. Поскольку $\hat{F}$ является оператором в пространстве спиновых функций с $s = 1/2$ его всегда можно представить в виде линейной комбинации матриц Паули $\hat{\sigma}_i$ и единичного оператора $\hat{I}$, которые образуют в этом пространстве полный набор операторов:

$$\hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = A(\mathbf{k}', \mathbf{k})\hat{I} + \sum_{i=1}^{3} \beta_i(\mathbf{k}', \mathbf{k})\,\hat{\sigma}_i \quad ; \qquad (17.6)$$

здесь $A(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ и $\beta_i(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ — некоторые функции $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$. Оператор амплитуды (17.6) будет инвариантом произвольного поворота и инверсии только в том случае, если $A(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ будет скаляром, а величины $\beta_i(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ — компонентами некоторого псевдовектора. Введем три единичных вектора:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{k}'}{|\mathbf{k} \times \mathbf{k}'|}; \quad \mathbf{l} = \frac{\mathbf{k} + \mathbf{k}'}{|\mathbf{k} + \mathbf{k}'|}; \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}'}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \quad . \qquad (17.7)$$

Нетрудно проверить, что при $k = k'$ они попарно ортогональны, а поэтому могут быть взяты в качестве базиса трехмерного пространства. Тогда вектор $\boldsymbol{\beta}$ можно представить в виде

$$\boldsymbol{\beta} = B\mathbf{n} + C\mathbf{l} + D\mathbf{q} \quad , \qquad (17.8)$$

где B, C, D — некоторые скалярные или псевдоскалярные функции $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$. При инверсии $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ изменяют знак, а поэтому изменяют знак также $\mathbf{l}$ и $\mathbf{q}$. Поэтому из инвариантности оператора (17.6) относительно пространственной инверсии следует, что $C = 0$ и $D = 0$, а функции $A(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ и $B(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ — скаляры. Эти функции зависят от функции $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ только через скалярные комбинации $\mathbf{k}^2 = \mathbf{k}'^2$ и $(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k})$, т. е. являются функциями энергии E и

угла рассеяния θ. Таким образом, оператор амплитуды рассеяния имеет следующий общий вид:

$$\hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = A(E, \theta) + B(E, \theta)(\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \quad , \qquad (17.9)$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к плоскости рассеяния. Явный вид функций $A(E, \theta)$ и $B(E, \theta)$ определяется спецификой взаимодействия. Дифференциальное сечение рассеяния на угол θ в случае, когда проекция спина частицы на ось z в начальном состоянии равна m, а в конечном — m', дается формулой

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{m'm}}{\mathrm{d}\Omega} = \left|\langle m'|\hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k})|m\rangle\right|^2 =$$

$$= |A(E, \theta)\delta_{mm'} + B(E, \theta)\langle m'|\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|m\rangle|^2 \ . \quad (17.10)$$

Если детектор, регистрирующий рассеянные частицы, не чувствителен к проекции спина этих частиц, наблюдаемое в этом случае дифференциальное сечение следует вычислять, просуммировав выражение (17.10) по всем возможным значениям m':

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \sum_{m'} \frac{\mathrm{d}\sigma_{m'm}}{\mathrm{d}\Omega} \quad . \qquad (17.11)$$

Используя (17.10), находим

$$\overline{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}} = |A(E, \theta)|^2 + |B(E, \theta)|^2 +$$

$$+2\mathrm{Re}(A^* B)\langle m|\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}|m\rangle \ . \quad (17.12)$$

Отсюда видно, если падающий поток частиц поляризован, а $\mathrm{Re}(A^* B) \neq 0$, то вероятность рассеяния зависит не только от полярного угла рассеяния θ, но и от направления вектора $\mathbf{n}$.

Если пучок падающих частиц не поляризован, то в нем с одинаковыми вероятностями представлены частицы с различными значениями m. Для вычисления дифферен-

циального сечения рассеяния таких частиц следует усреднить (17.11) по m:

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}} = \frac{1}{2}\sum_{m}\left\langle m\left|\hat{F}^{+}\hat{F}\right|m\right\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\left(\hat{F}^{+}\hat{F}\right) \ . \qquad (17.13)$$

В этом случае сечение выражается через след матрицы оператора $\hat{F}^{+}\hat{F}$. Используя известные свойства матриц Паули, получаем

$$\overline{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}} = |A(E,\theta)|^2 + |B(E,\theta)|^2 \ . \qquad (17.14)$$

Теперь допустим, что детектор чувствителен к значению проекции спина регистрируемой частицы. Тогда можно измерить распределение этой величины для частиц, рассеянных в данном направлении. Для характеристики этого распределения принято использовать величину среднего значения спина, которая называется ***вектором поляризации*** и определяется следующим образом:

$$\mathbf{P} = \overline{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} \ , \qquad (17.15)$$

где $^1/_2\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — вектор спина, а черта означает усреднение по его проекции.

Сперва предположим, что все частицы падающего пучка находятся в состоянии с определенным значением m проекции спина на ось z. В этом случае вектор поляризации рассеянных частиц есть

$$\mathbf{P}_m = \frac{\left\langle m\left|\hat{F}^{+}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\,\hat{F}\right|m\right\rangle}{\left\langle m\left|\hat{F}^{+}\,\hat{F}\right|m\right\rangle} \ . \qquad (17.16)$$

Пусть теперь в падающем пучке различные значения m представлены с одинаковыми вероятностями, т.е. вектор поляризации бомбардирующих частиц равен нулю. В этом случае для вычисления вектора поляризации **P** рассеянных

частиц надо произвести усреднение вектора $\mathbf{P}_m$, учитывая равные статистические веса разных проекций спина m в начальном состоянии:

$$\mathbf{P} = \frac{\sum_m \langle m | \hat{F}^+ \, \hat{\boldsymbol{\sigma}} \, \hat{F} | m \rangle}{\sum_m \langle m | \hat{F}^+ \, \hat{F} | m \rangle} = \frac{\mathrm{Sp}\left(\hat{F}^+ \, \hat{\boldsymbol{\sigma}} \, \hat{F}\right)}{\mathrm{Sp}\left(\hat{F}^+ \, \hat{F}\right)} \quad . \qquad (17.17)$$

Наконец, подставляя сюда (17.9), окончательно получаем

$$\mathbf{P} = \frac{2\mathrm{Re}(A^* \, B)}{|A|^2 + |B|^2} \mathbf{n} \; . \qquad (17.18)$$

Итак, в результате рассеяния первоначально неполяризованного пучка частиц со спином $s = 1/2$ на бесспиновых частицах, вообще говоря, происходит поляризация частиц. Она зависит от энергии частиц E и угла рассеяния θ. При этом вектор поляризации $\mathbf{P}$ всегда направлен перпендикулярно плоскости рассеяния, а его абсолютная величина существенно зависит от значения $\mathrm{Re}(A^* B)$.

Обращаясь к (17.18) и (17.12), мы видим, что поляризация возникает при тех же условиях, при которых имеет место азимутальная асимметрия рассеяния поляризованных частиц. Поляризационный эффект существенно зависит от относительной фазы амплитуд $A(E, \theta)$ и $B(E, \theta)$ и обращается в нуль, если одна из них равна нулю.

§ 17.2. Рассмотрение поляризационных явлений на основе аппарата спиновой матрицы плотности

Способ рассмотрения поляризации при столкновениях, которым мы пользовались в предыдущем параграфе, является хотя и наглядным, но в техническом отношении довольно громоздким. Те же, а также и другие, более общие результаты можно получить с помощью аппарата спиновой матрицы плотности. Такой способ является, как мы увидим,

и не менее физичным и, несомненно, более изящным с точки зрения математики.

Как известно (см., например, [1, § 45]), спиновое состояние частицы со спином $s = 1/2$ характеризуется в самом общем случае матрицей плотности размерности 2x2:

$$\hat{\rho} = {}^{1}\!/_{2}\,(1 + \mathbf{P} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \quad , \qquad (17.19)$$

где $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — вектор из трех матриц Паули, а $\mathbf{P}$ — числовой вектор, указывающий среднее направление и среднюю величину вектора спина частиц в рассматриваемом состоянии:

$$\langle \mathbf{s} \rangle = {}^{1}\!/_{2}\,\mathbf{P} \ . \qquad (17.20)$$

Модуль этого вектора $P = |\mathbf{P}|$ есть степень поляризации частицы. Только при $P = 1$ матрица плотности (17.19) удовлетворяет критерию чистого состояния $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$; в этом случае всегда можно указать такое направление, проекция спина на которое имеет определенное значение $+1/2$ или $-1/2$; другими словами, в этом случае спиновое состояние частицы можно описать некоторой одной волновой функцией (вектором состояния). В противоположном случае, когда $P = 0$, спиновая матрица плотности (17.19) пропорциональна единичной матрице. Такая матрица плотности описывает неполяризованную систему: никакое направление в пространстве не выделено по отношению к любым спиновым характеристикам состояния. В промежуточном случае $0 < P < 1$ мы имеем дело с частично поляризованной системой. Во всех случаях, кроме $P = 1$, спиновое состояние частицы является смешанным.

Применяя аппарат спиновой матрицы плотности в теории столкновений, мы ограничимся простейшим случаем рассеяния частицы со спином $s = 1/2$ на неподвижном силовом центре (частице со спином $s = 1/2$) . Пусть матрицы

$$\hat{\rho}_i = {}^1\!/_2\,(1 + \mathbf{P}_i\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \qquad (17.21)$$

и

$$\hat{\rho}_f = {}^1\!/_2\,(1 + \mathbf{P}_f\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \qquad (17.22)$$

характеризуют спиновое состояние частиц до и после столкновения. Согласно общим правилам, матрицу плотности конечного состояния $\hat{\rho}_f$ можно выразить через матрицу плотности начального состояния $\hat{\rho}_i$ по формуле

$$\hat{\rho}_f \sim \hat{F}\ \hat{\rho}_i\,\hat{F}^+\ , \qquad (17.23)$$

где $\hat{F} = \hat{F}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ — амплитуда рассеяния (или, как мы говорили в предыдущем параграфе, оператор амплитуды рассеяния), для которой в рассматриваемом случае справедлива формула (17.9).

Дифференциальное сечение рассеяния частиц безотносительно к их поляризации в конечном состоянии дается выражением

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \mathrm{Sp}\,\hat{F}\,\hat{\rho}_i\,\hat{F}^+ \quad . \qquad (17.24)$$

Подставим сюда (17.21) и (17.19):

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |A(E,\theta)|^2 + |B(E,\theta)|^2 + \\ +2\mathrm{Re}[A^*(E,\theta)\cdot B(E,\theta)](\mathbf{n}\cdot\mathbf{P}_i) \quad . \qquad (17.25)$$

Мы получили формулу, обобщающую уже известный результат (17.9) и (17.14) для случаев полностью поляризованного ($P_i = 1$) и неполяризованного ($P_i = 0$) падающих пучков. Из нее видно, что рассеяние частично поляризованных частиц, вообще говоря, азимутально асимметрично; условием возникновения азимутальной

асимметрии является наличие интерференции между амплитудами рассеяния $A(E,\theta)$ и $B(E,\theta)$:

$$\mathrm{Re}[A^*(E,\theta)\cdot B(E,\theta)] \neq 0 \quad . \qquad (17.26)$$

Формулу (17.25) можно записать еще и по-другому:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\mathrm{d}\sigma^{(0)}}{\mathrm{d}\Omega}\left\{1 + \mathbf{P}^{(0)}\mathbf{P}_i\right\} \equiv \frac{\mathrm{d}\sigma^{(0)}}{\mathrm{d}\Omega}\{1 + \mathcal{A}\} \ . \qquad (17.27)$$

Сюда вошли уже знакомые нам величины — дифференциальное сечение рассеяния неполяризованных частиц (формула (17.14)):

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^{(0)}}{\mathrm{d}\Omega} = |A|^2 + |B|^2 \qquad (17.28)$$

и вектор поляризации этих частиц после рассеяния (формула 17.18)):

$$\mathbf{P}^{(0)} = \frac{2\mathrm{Re}(A^*B)}{|A|^2 + |B|^2}\mathbf{n} \quad . \qquad (17.29)$$

Коэффициент

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}(\mathbf{k}', \mathbf{k};\ \mathbf{P}_i) \equiv \mathbf{P}^{(0)}\mathbf{P}_i = \frac{2\mathrm{Re}(A^*B)}{|A|^2 + |B|^2}(\mathbf{n}\mathbf{P}_i) \qquad (17.30)$$

будем называть **коэффициентом азимутальной асимметрии** рассеяния. Из (17.30) видно, что составляющая вектора поляризации падающих частиц, лежащая в плоскости рассеяния (в частности, продольная составляющая по отношению к импульсу падающих частиц), не дает никакого вклада в рассеяние. Уместно подчеркнуть, что выводы, к которым мы пришли, основаны исключительно на симметрийных соображениях о процессе столкновения.

Теперь рассмотрим вопрос, которого мы в предыдущем параграфе совсем не касались, о поляризации частиц в конечном состоянии при рассеянии частично

поляризованных частиц. Здесь достоинства аппарата спиновой матрицы плотности проявляются особенно ярко.

Нормируем матрицу плотности конечного состояния согласно общепринятому условию:

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\rho}_f = 1 \quad . \tag{17.31}$$

Тогда, снова подставляя (17.21) и (17.9) в (17.23), получаем

$$\hat{\rho}_f = \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{\mathbf{P}^{(0)}\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \dfrac{|A|^2(\mathbf{P}_i\hat{\boldsymbol{\sigma}}) + |B|^2(\mathbf{n}\mathbf{P}_i)(\mathbf{n}\hat{\boldsymbol{\sigma}})}{|A|^2 + |B|^2}}{1 + \mathcal{A}}\right\}. \tag{17.32}$$

Учитывая общую форму матрицы плотности (17.22), получаем выражение для вектора поляризации рассеянных частиц:

$$\mathbf{P}_f = \frac{\mathbf{P}^{(0)} + \dfrac{|A|^2\mathbf{P}_i + |B|^2(\mathbf{n}\mathbf{P}_i)\mathbf{n}}{|A|^2 + |B|^2}}{1 + \mathcal{A}} \quad . \tag{17.33}$$

В числителе мы видим два слагаемых. Первое, $\mathbf{P}^{(0)} = P^{(0)}\mathbf{n}$, не связано с наличием поляризации падающих частиц. Второе, пропорциональное степени поляризации падающих частиц $\mathbf{P}_i$ представлено в виде суммы двух компонент — вдоль вектора $\mathbf{P}_i$, с весом $|A|^2/(|A|^2 + |B|^2)$, и вдоль нормали к плоскости рассеяния $\mathbf{n}$ с весом $|B|^2/(|A|^2 + |B|^2)$.

В частном случае, когда сам вектор $\mathbf{P}_i$ направлен по $\mathbf{n}$ т.е. $\mathbf{P}_i = P_i\mathbf{n}$, имеем

$$\mathbf{P}_f = \frac{P^{(0)} + P_i}{1 + P^{(0)}P_i}\mathbf{n} \quad . \tag{17.34}$$

Отсюда видно, что при рассеянии частично поляризованных частиц $(0 < |\mathbf{P}_i| < 1)$ возможно как увеличение степени их поляризации $\left(|\mathbf{P}_f| > |\mathbf{P}_i|\right)$, так и их частичная

деполяризация $\left(\left|\mathbf{P}_f\right| < \left|\mathbf{P}_i\right|\right)$, причем переход от одного случая к другому соответствует изменению знака направления вектора начальной поляризации $\mathbf{P}_i$ относительно вектора $\mathbf{n}$. В предельном случае, когда пучок падающих частиц полностью поляризован перпендикулярно плоскости рассеяния $(\mathbf{P}_i = \pm\mathbf{n})$, деполяризации частиц при рассеянии не происходит.

§ 17.3. Рассеяние тождественных частиц

До сих пор мы предполагали, что сталкивающиеся частицы различны. Поэтому, вводя понятие дифференциального сечения рассеяния, мы считали возможным отделить случай рассеяния в заданном направлении Ω частицы из падающего пучка от случая рассеяния в этом направлении частицы мишени. Если же сталкивающиеся частицы тождественны, этого сделать нельзя. Будем называть дифференциальным сечением рассеяния тождественных частиц величину $\mathrm{d}\sigma(\Omega)$ равную отношению потока $\mathrm{d}I(\Omega)$ любых частиц, вылетающих в телесный угол $\mathrm{d}\Omega$, к плотности потока падающих частиц относительно мишени. Пользуясь Ц-системой, поток частиц, вылетающих в направлении n, можно представить в виде

$$\mathrm{d}I(\Omega) = \mathrm{j}_{\mathrm{in}}\left|\tilde{f}(\mathbf{n})\right|^2 \mathrm{d}\Omega + \mathrm{j}_{\mathrm{in}}\left|\tilde{f}(-\mathbf{n})\right|^2 \mathrm{d}\Omega \quad , \qquad (17.35)$$

где $\tilde{f}(\mathbf{n})$ — амплитуда рассеяния, которая должна определяться из асимптотики соответствующим образом симметризованной волновой функции. В соответствии с нашим определением дифференциального сечения рассеяния тождественных частиц отсюда получаем

$$\mathrm{d}\sigma(\Omega) = \left(\left|\tilde{f}(\mathbf{n})\right|^2 + \left|\tilde{f}(-\mathbf{n})\right|^2\right)\mathrm{d}\Omega \quad . \qquad (17.36)$$

Найдем амплитуду рассеяния $\tilde{f}(\mathbf{n})$. Пусть $\Psi(\mathbf{r}, m_1, m_2)$ есть волновая функция, описывающая движение тождественных частиц в Ц-системе. Здесь

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \qquad (17.37)$$

определяется координатами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ налетающей частицы и частицы-мишени, а m_1 и m_2 — проекции спинов сталкивающихся частиц на ось z. Представим волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, m_1, m_2) = \Phi(\mathbf{r})\chi_{SM}(m_1, m_2) \ , \qquad (17.38)$$

где $\Phi(\mathbf{r})$ — координатная функция, $\chi_{SM}(m_1, m_2)$ — спиновая функция, S — суммарный спин двух частиц, M — его проекция на ось z. Волновая функция системы двух тождественных частиц должна быть либо симметричной, либо антисимметричной относительно перестановки частиц в зависимости от того, являются они бозонами или фермионами, т.е. имеют целый или полуцелый спин s. Из (17.37) видно, что при перестановке, частиц вектор r меняет знак. Поэтому волновая функция системы двух тождественных частиц должна удовлетворять условию

$$\Psi(-\mathbf{r}, m_2, m_1) = (-1)^{2s}\Psi(\mathbf{r}, m_1, m_2) \, . \qquad (17.39)$$

Знак спиновой функции при перестановке переменных двух частиц определяется формулой

$$\chi_{SM}(m_2, m_1) = (-1)^{2s-S}\chi_{SM}(m_1, m_2) \ . \qquad (17.40)$$

Тогда из (17.38) и (17.39) получаем

$$\Phi(-\mathbf{r}) = (-1)^{S}\Phi(\mathbf{r}) \ . \qquad (17.41)$$

Следовательно, координатная функция системы из двух тождественных частиц должна быть четной при четном S и нечетной при нечетном S. Поэтому, если четность является интегралом движения, суммарный спин S системы сохраняется.

В связи с этим имеет смысл рассмотреть столкновение двух тождественных частиц, находящихся в состоянии с определенным значением S суммарного спина. Пусть $\psi(\mathbf{r})$ есть волновая функция, описывающая движение частицы в Ц-системе. Тогда симметризованную функцию $\Phi(\mathbf{r})$ в соответствии с (16.86) можно представить в виде

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\mathbf{r}) + \psi(-\mathbf{r})] & \text{при четном } S; \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\mathbf{r}) - \psi(-\mathbf{r})] & \text{при нечетном } S, \end{cases} \tag{17.42}$$

где множитель $1/\sqrt{2}$ выбран из условия, чтобы плотность потока падающих частиц в состоянии Φ равнялась плотности потока в состоянии ψ. Рассматривая асимптотику функции (17.42), получаем амплитуду рассеяния тождественных частиц:

$$\tilde{f}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[f(\mathbf{n}) \pm f(-\mathbf{n})] \quad , \tag{17.43}$$

где $f(\mathbf{n})$ — коэффициент при расходящейся сферической волне в асимптотике функции $\psi(\mathbf{r})$. Подставляя это выражение в (17.36), находим дифференциальное сечение:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = 2\left|\tilde{f}(\mathbf{n})\right|^2 = \begin{cases} |f(\mathbf{n}) + f(-\mathbf{n})|^2 & \text{при четном } S; \\ |f(\mathbf{n}) - f(-\mathbf{n})|^2 & \text{при нечетном } S, \end{cases} \tag{17.44}$$

В частном случае рассеяния тождественных частиц, связанных центрально-симметричным взаимодействием, отсюда получаем

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \quad . \tag{17.45}$$

Это сечение симметрично относительно $\theta = \pi/2$, что является прямым следствием неразличимости сталки-

вающихся частиц. Заметим, что при $\theta = \pi/2$ дифференциальное сечение рассеяния в состоянии с нечетным S равно нулю. В то же время при четном S сечение рассеяния оказывается, как это видно из (17.45), в 4 раза больше сечения $|f|^2$, которое следовало бы ожидать для нетождественных частиц. Запишем (17.45) по-другому:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 \pm 2\,\mathrm{Re}[f^*(\theta)f(\pi-\theta)]\ . \quad (17.46)$$

В этом виде дифференциальное сечение, даваемое квантовой теорией, удобно сравнить с тем, которое получается в классической механике для столкновения двух одинаковых частиц:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{class}} = \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} + \frac{d\sigma(\pi-\theta)}{d\Omega} \quad . \quad (17.47)$$

Здесь первое слагаемое есть сечение рассеяния под углом θ частиц из падающего пучка, а второе слагаемое — сечение рассеяния тех же частиц под углом $\pi - \theta$, равное сечению рассеяния под углом θ частиц мишени. Третье же слагаемое в выражении, (17.46) не имеет аналога в классической механике. Этот член описывает существенно квантовое явление — интерференцию амплитуд рассеяния под углами θ и $\pi - \theta$. Его называют обменным членом. При $\theta = \pi/2$ абсолютная величина обменного члена равна оставшейся части дифференциального сечения, которую по аналогии с (17.47) можно назвать «классической частью». При нечетном S они погашают друг друга и квантовое сечение равно нулю, а при четном S за счет обменного члена квантовое сечение в 2 раза больше «классической части».

До сих пор предполагалось, что сталкивающиеся частицы находятся в состоянии с определенным значением суммарного спина S. Если же падающий пучок и мишень поляризованы, то наблюдаемое сечение будет сечением,

усредненным по различным начальным спиновым состоянием. Рассмотрим этот вопрос на примере столкновения двух частиц со спином $1/2$. Поскольку суммарный спин сохраняется, усредненное сечение можно представить в виде

$$\overline{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}} = \frac{3}{4}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{S=1} + \frac{1}{4}\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{S=0} \quad . \qquad (17.48)$$

$3/4$ — статистический вес триплетных состояний, а $1/4$ — синглетного состояния. Подставляя сюда (17.44), получаем

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = |f(\mathbf{n})|^2 + |f(-\mathbf{n})|^2 - \mathrm{Re}[f^*(\mathbf{n})f(-\mathbf{n})] \quad . \qquad (17.49)$$

Таким образом, обменный эффект проявляется при рассеянии не только поляризованных, но и неполяризованных частиц.

§ 17.4. Эффекты тождественности частиц при столкновении составных систем

Учет тождественности частиц при описании электрон-атомных столкновений или ядерных реакций под действием нуклонов вносит существенное усложнение в аппарат теории. С тождественностью сталкивающихся частиц связан также ряд особых физических эффектов, представляющих большой интерес и в атомной, и в ядерной физике.

Рассмотрим сначала на простейшем примере взаимодействия электронов с атомом водорода, как модифицируются при учете тождественности электронов уравнения многоканальной задачи рассеяния, которые мы получили в § 10.1. Для этого полную волновую функцию всей системы, которую мы, согласно (10.2), должны разложить по полному набору атомных волновых функций, запишем явно как функцию координат двух электронов — налетающего и атомного:

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}) \to \Psi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) \quad , \qquad (17.50)$$

В предыдущем параграфе было показано, что суммарный спин двух электронов S, а вместе с ним и четность их координатной волновой функции относительно перестановки $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ сохраняется в процессе столкновения:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (-1)^S \, \Psi(\mathbf{r_2}, \mathbf{r_1}) \quad , \qquad (17.51)$$

Это значит, что вместо разложения (10.3) мы должны использовать разложение по симметризованному базису:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathrm{n}} [\mathrm{u_n}(\mathbf{r}_1)\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r}_2) + (-1)^S \, \mathrm{u_n}(\mathbf{r}_2)\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r}_1)] \, , \qquad (17.52)$$

где $\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})$ — волновые функции стационарных состояний атома водорода (как и раньше, подразумевается, что знак Σ в (17.52) обозначает и бесконечную сумму по дискретному спектру, и интеграл по непрерывному спектру). При этом искомые канальные функции $\mathrm{u_n}(\mathbf{r})$ по-прежнему удовлетворяют асимптотическим условиям (10.7).

Полный гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}_1^2}{2\mu} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}_2^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{21}} \quad . \qquad (17.53)$$

Подставим (17.52) и (17.53) в стационарное уравнение Шредингера (10.1). Умножая обе части этого уравнения на функцию $\varphi_{\mathrm{n}}^*(\mathbf{r}_2)$ и интегрируя по $\mathbf{r}_2$ с учетом ортонормированности базиса $\varphi_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})$, получаем вместо дифференциальных уравнений (10.4) систему связанных интегродифференциальных уравнений для канальных функций $\mathrm{u_n}(\mathbf{r})$:

$$\left(\hat{h}_{\mathrm{n}} - E\right)\mathrm{u}_{\mathrm{n}}(\mathbf{r}) = -\sum_{\mathrm{m}\neq\mathrm{n}} V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r})\mathrm{u}_{\mathrm{m}}(\mathbf{r}) -$$

$$-(-1)^{S}\sum_{\mathrm{m}}\int W_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\mathrm{u}_{\mathrm{m}}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r' \quad , \qquad (17.54)$$

где, как и в § 10.1,

$$\hat{h}_{\mathrm{n}} = \hat{\mathbf{p}}^2/2\mu + \varepsilon_{\mathrm{n}} + V_{\mathrm{nn}}(\mathbf{r}) \quad , \qquad (17.55)$$

$$V_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r}) = \int \varphi_{\mathrm{n}}^{*}(\mathbf{r}')\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\varphi_{\mathrm{m}}(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3r' \quad . \qquad (17.56)$$

Функции $W_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$, входящие в интегральную часть уравнений, выражаются через атомные волновые функции и другие известные величины:

$$W_{\mathrm{nm}}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \varphi_{\mathrm{n}}^{*}(\mathbf{r})\left[\varepsilon_{\mathrm{n}}+\varepsilon_{\mathrm{m}} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - E\right]\varphi_{\mathrm{m}}(\mathbf{r}') \, . \quad (17.57)$$

Система уравнений (17.54) при ограниченном числе учитываемых каналов $(\mathrm{m},\mathrm{n} = 1,2,\cdots,\mathrm{N})$ вместе с дополнительными условиями (10.7) выражает **приближение сильной связи каналов с учетом обмена**.

Свойства канальных функций $\mathrm{u}_{\mathrm{n}}(\mathbf{r})$, удовлетворяющих системе уравнений (17.54), в том числе и их асимптотические свойства при $r \to \infty$,

$$\mathrm{u}_{\mathrm{n}}^{(S)}(\mathbf{r})\Big|_{r\to\infty} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}\delta_{\mathrm{n}1} + f_{\mathrm{n}}^{(S)}(\mathbf{k}_{\mathrm{n}}', \mathbf{k}_1)\frac{\mathrm{e}^{ik_{\mathrm{n}}r}}{r} \quad , \qquad (17.58)$$

т.е. значения амплитуд упругого или неупругого рассеяния $f_{\mathrm{n}}^{(S)}$, зависят от суммарного спина S налетающего и атомного электронов. Если падающий пучок электронов неполяризован, то веса триплетного и синглетного состояний пары электронов равны соответственно 3/4 и 1/4, и диффе-ренциальное сечение рассеяния дается выражением

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}\Omega} =$$

$$= \frac{k_{\mathrm{n}}}{k_1}\left[\frac{3}{4}\left|f_{\mathrm{n}}^{(S=1)}(\mathbf{k}'_{\mathrm{n}}, \mathbf{k}_1)\right|^2 + \frac{1}{4}\left|f_{\mathrm{n}}^{(S=0)}(\mathbf{k}'_{\mathrm{n}}, \mathbf{k}_1)\right|^2\right]. \quad (17.59)$$

Частным случаем приближения сильной связи с обменом является так называемое **приближение замороженного остова**, которое довольно широко используется в расчетах упругого рассеяния электронов на атомах. При таком подходе в правой части выражения (17.54) сохраняет лишь единственное слагаемое, отвечающее основному состоянию атома, и волновая функция рассеиваемого электрона удовлетворяет интегродифференциальному уравнению

$$\left(\hat{h}_1 - E\right)\mathrm{u}_1(\mathbf{r}) = -(-1)^S \int W_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathrm{u}_1(\mathbf{r}')\mathrm{d}^3 r' . \quad (17.60)$$

Упражнения

17.1. В борновском приближении найти усредненное по поляризации дифференциальное сечение рассеяния частиц со спином $s = 1/2$ на потенциале со спин-орбитальным взаимодействием:

$$V = V_1(r) + V_2(r)(\boldsymbol{\ell} \cdot \hat{\mathbf{s}}) .$$

Описывает ли борновское приближение поляризацию рассеянных частиц?

17.2. Используя гриновский оператор $\hat{G}_{\mathrm{n}}^{(+)}(E)$, найти формальное решение уравнения (17.54) и его асимптотику. Показать, что точное выражение амплитуды рассеяния при использовании приближения сильной связи с обменом имеет вид

$$f_{\mathrm{n}}(\mathbf{k}'_{\mathrm{n}}, \mathbf{k}_1) = \delta_{\mathrm{n}1} f_{\mathrm{pot}}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_1) -$$

$$-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left\{\sum_{m\neq n}\int \psi^{(-)*}_{n,\mathbf{k}'_n}(\mathbf{r})\ V_{nm}(\mathbf{r})\ u_m(\mathbf{r})d^3r + \right. \qquad (17.62)$$

$$\left. +(-1)^S\sum_m\int\int \psi^{(-)*}_{n,\mathbf{k}'_n}(\mathbf{r})\ W_{nm}(\mathbf{r},\mathbf{r}')u_m(\mathbf{r}')d^3r d^3r'\right\}.$$

Сравнить с выражениями (10.26) и (10.29), полученными без учета обмена.

17.3. Используя (17.62), найти амплитуду рассеяния электрона на атоме водорода в борновском приближении с учетом обмена (**приближение Борна — Оппенгеймера**).

17.4. Показать, что благодаря обменным эффектам при неупругом рассеянии электронов атомом гелия оказываются возможными, даже в отсутствие спиновых слагаемых в гамильтониане системы, переходы с изменением полного спина атома.

Литература

1. Балашов В.В., Долинов В.К., Курс квантовой механики. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982.
2. Давыдов А.С., Квантовая механика. — М.: Наука, 1973.
3. Ватсон Г.Н., Теория бесселевых функций. — М.: ИЛ, 1949.
4. Лебедев Н.Н., Специальные функции и их приложения. — М.: Физматгиз, 1963.
5. Гольдбергер М., Ватсон К., Теория столкновений. — М.: Мир, 1967.
6. Тейлор Дж., Теория рассеяния. — М.: Мир, 1975.
7. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М., Рассеяние реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, 1971.
8. Теоретический практикум по ядерной и атомной физике, под ред. В.В.Балашова. — М.: Энергоатомиздат, 1984.
9. Материалы VIII зимней школы ЛИЯФ по физике ядра и элементарных частиц, часть II. — Л., 1973.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Механика. — М.: Наука, 1970.
11. Мотт Н., Месси Г., Теория атомных столкновений. — М.: Мир, 1969.
12. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славнов С.Ю., Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. — М.: Наука, 1976.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Квантовая механика. — М.: Наука, 1974.
14. Ширков Д.В., Серебряков В.В., Мещеряков В.А., Дисперсионные теории сильных взаимодействий при низких энергиях. — М.: Наука, 1967.
15. Ситенко А.Г., Теория ядерных реакций. — М.: Энергоатомиздат, 1983.
16. Глаубер Р. Успехи физических наук, 1971, т. 103, с. 641.
17. Лендьел В.И., Салак М. Нерелятивистская квантовая теория рассеяния. — Львов, Вища школа, 1983.

Научное издание

БАЛАШОВ Всеволод Вячеславович

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ

Издательство ООО “МАКС Пресс”
Лицензия ИД N 00510 от 01.12.99 г.
Подписано в печать 05.07.2012 г.
Печать офсетная. Бумага офсетная.
Формат 60x90 1/16. Усл.печ.л. 18,25. Тираж 105 экз. Изд. № 264.

119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В. Ломоносова,
2-й учебный корпус, 527 к.
Тел. 939-3890, 939-3891. Тел./Факс 939-3891.

Напечатано с готового оригинал-макета

Типография МГУ
119991, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 15
Заказ № 0833