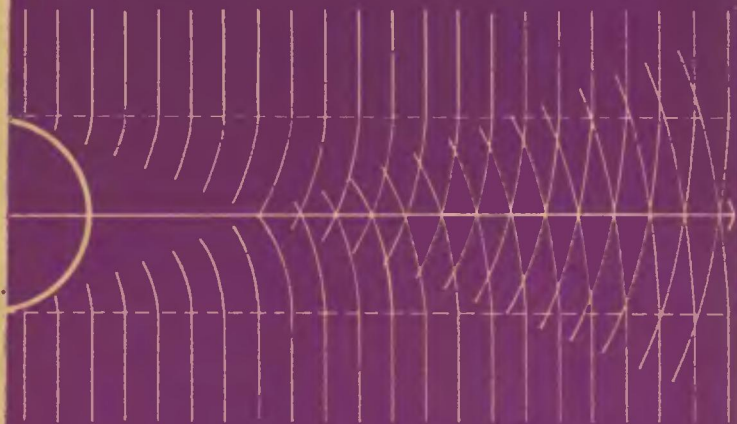


С. Сунакава

**Квантовая
теория
рассеяния**



**Издательство
«Мир»**

散乱の量子論

砂川重信著



岩波全書 296

С. Сунакава

Квантовая теория рассеяния

Перевод с японского

канд. физ.-мат. наук И. И. ИВАНЧИКА

под редакцией

д-ра физ.-мат. наук И. М. ДРЕМИНА



Издательство «Мир»

Москва 1979

В книге японского физика-теоретика, профессора Осацкого университета С. Сунакавы излагаются основные методы и результаты нерелятивистской квантовой теории рассеяния: стационарная теория рассеяния одной частицы на потенциале, разложение по парциальным волнам, нестационарная теория рассеяния (общая теория S -матрицы), теория рассеяния в задаче трех тел.

Книга предназначена для физиков, аспирантов и студентов старших курсов, специализирующихся по квантовой теории, а также для тех, кто, работая в других областях физики, хотел бы получить основную информацию о квантовомеханическом решении задач рассеяния.

Редакция литературы по физике

1704020000

С $\frac{20402-050}{041(01)-79}$ 50—79

© Iwanami Shoten, 1977

© Перевод на русский язык, «Мир», 1979

Предисловие редактора перевода

Книга С. Сунакавы представляет собой подробное изложение одного из наиболее важных разделов квантовой механики — теории рассеяния. Автор ограничивается лишь нерелятивистской областью энергий, не затрагивая непосредственно вопросов теории взаимодействия квантованных полей. Вместе с тем этот раздел квантовой механики ближе всего подводит читателя к проблемам релятивистской теории, и потому все изложение в книге (теория матрицы рассеяния, уравнения Липпмана — Швингера и Фаддеева, диаграммное описание процессов рассеяния, использование различных представлений, упорядочение операторов и т. п.) фактически нацелено на подготовку читателя к последующему знакомству с теми методами, которые применяются в квантовой теории поля. Нерелятивистская теория рассеяния рассмотрена автором очень подробно. Несомненным достоинством книги является то, что все математические выкладки поясняются в тексте. Это особенно важно для тех, кто только начинает изучение теории столкновений и, открывая учебник, зачастую бывает поставлен в тупик фразами типа: «Легко показать, что...», за которыми без пояснений следует сложная окончательная формула.

Сравнительно малый объем книги при столь подробном изложении заставил автора отказаться от рассмотрения некоторых важных разделов теории рассеяния, например аналитических свойств амплитуды рас-

сеяния, дисперсионных соотношений, вариационного подхода к теории рассеяния и т. п., простейшие сведения о которых можно найти в обычных курсах квантовой механики. В то же время в книге рассмотрена привлекающая к себе в последнее время большое внимание проблема рассеяния в системе трех тел, которой обычно уделяется значительно меньше места. Несмотря на подробно проводимые расчеты, книга не претендует на полную математическую строгость, а скорее преследует цель познакомить с применением математических методов в физических задачах теории рассеяния и с неизбежными в этом случае приближенными подходами к решению таких задач. Большое внимание уделяется чисто физическим трудностям, возникающим в конкретных приложениях.

При таком выборе материала и методе изложения книга оказывается ценным промежуточным звеном между традиционными курсами квантовой механики и требующими серьезной подготовки специальными монографиями, в которых дается формальная математическая трактовка теории столкновений. Она обращена к широкой аудитории физиков, знакомых с основами квантовой механики и приступающих к углубленному изучению проблем взаимодействия квантовых объектов, с которыми приходится сталкиваться буквально во всех разделах физики, начиная от теории конденсированных сред до теории элементарных частиц.

При переводе были устранены все опечатки, обнаруженные в японском тексте. В ряде мест добавлены краткие примечания, поясняющие мысль автора или терминологию.

И. М. Дремин

Введение

Самый общий метод изучения структуры вещества состоит в исследовании распределения частиц, рассеиваемых при их столкновениях. Экспериментальные данные в современной физике почти всегда сравнивают с результатами расчетов, основанных на квантовой теории рассеяния. Поэтому естественно, в курсах теоретической физики при изложении квантовой механики рассматривается и теория рассеяния. Но в учебниках квантовой механики обычно ограничиваются изложением простой стационарной теории потенциального рассеяния и первого приближения нестационарной теории возмущений. Между тем еще в первые послевоенные годы Липпман и Швингер разработали общую операторную теорию, трактующую рассеяние с точки зрения переходов между квантовыми состояниями. Основанное на их идеях дальнейшее развитие теории рассеяния привело к большим успехам, и в настоящее время исследования проблем рассеяния базируются на теории S -матрицы.

В Японии до сих пор не издано ни одной монографии по теории рассеяния. Потребность в такой монографии давно назрела. Это станет особенно очевидным, если учесть место теории рассеяния в современной теоретической физике и ее бурное развитие в последнее время. Я вряд ли решился бы писать книгу по теории рассеяния, если бы с самого начала знал эту теорию достаточно глубоко. Для понимания моей

книги необходимо знакомство с основами квантовой механики в объеме, сообщаемом студентам старших курсов; книга доступна аспирантам, прослушавшим магистерский курс квантовой механики, и специалистам-физикам. Моя цель будет достигнута, если книга поможет студентам или специалистам применять теорию рассеяния в своей работе.

При изложении материала я стремился не к формально-математической строгости, а к физически строгой формулировке картины рассеяния. При написании книги важен принцип отбора материала. Говорить вскользь об известных или исследованных вещах — по существу то же самое, что и вообще о них не упоминать. Поэтому я ограничился рассмотрением нерелятивистских систем, так как в противном случае нужно было бы объяснять основы квантовой теории поля, что невозможно в книге столь малого объема. Полностью опущены также эффективные в физике элементарных частиц методы, например современные способы анализа S -матрицы, дисперсионные соотношения, полюса Редже и т. д., так как они важны только в релятивистской области высоких энергий. Из-за нехватки места пришлось отказаться от изложения ряда приближенных методов, например вариационных. Если эту книгу рассматривать как учебник по теории рассеяния, то можно сказать, что в ней вводятся основные понятия, необходимые для студентов и специалистов по физике элементарных частиц и достаточные для тех, кто специализируется в других областях физики.

В гл. 1 дается определение сечения рассеяния (величины, наблюдаемой в этих явлениях) и кратко излагается теория рассеяния в классической механике. Гл. 2 посвящена стационарной теории рассеяния од-

ной частицы на потенциале. В гл. 3 дано разложение введенных во второй главе величин по парциальным волнам. Разложение это давно и хорошо известно, оно напоминает анализ рассеяния волн в классической механике. В гл. 4 рассмотрена нестационарная теория рассеяния — общая теория переходов между квантовыми состояниями (теория S -матрицы). Эта глава — ядро книги. Теорию S -матрицы можно применять к системам, не имеющим потенциала (существование которого подразумевалось в гл. 2), например к случаю взаимодействия поля с полем и к более сложным системам. В последней главе (гл. 5) изложена теория рассеяния с перегруппировкой частиц, развитая в самое последнее время. Таким образом, по содержанию книга заметно отличается от других монографий.

В данной книге ни разу не употреблена формулировка, встречающаяся в иных монографиях: «как следует из результатов расчета...». Все вычисления подробно комментируются. Поэтому часто попадаются места, написанные нетрадиционно, в связи с чем я опасаясь, что в изложение вкрались какие-нибудь неожиданные ошибки.

Эта книга вышла в свет главным образом благодаря искренним и настойчивым побуждениям со стороны М. Макино, сотрудника издательства «Иванами». В ходе печатания книги огромную помощь оказал Х. Мияути. Пользуюсь случаем выразить им глубокую благодарность.

Осень 1976 г.

С. Сунакава

Рассеяние и наблюдаемые величины

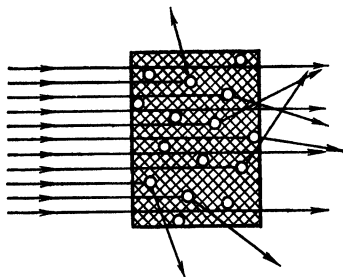
§ 1. Сечение рассеяния

Если мы хотим выяснить атомную структуру вещества, узнать внутреннее строение атомов, молекул, а тем более элементарных частиц, мы не можем взять интересующий нас объект в руки и разглядеть его, а должны действовать как-то иначе. Мы можем, например, заставить изучаемые частицы сталкиваться с другими частицами и исследовать распределение частиц, рассеиваемых в результате столкновений. Пусть в деревянном ящике, показанном на фиг. 1, укреплены в каком-то порядке мелкие камушки определенной формы. Если мы хотим узнать форму и расположение камушков в ящике, не вскрывая его, то мы можем попробовать не целясь стрелять в ящик из пистолета, посылая пули параллельно друг другу в направлении ящика. О форме камушков и их расположении в ящике можно судить, рассматривая распределение по направлениям вылета пуль, отклонившихся в результате удара о камушки, и подсчитывая число пуль, вышедших из ящика в прежнем направлении (не попавших в камушки). Разумеется, предварительно нужно, сделав какие-то предположения о форме и расположении камушков, рассчитать на основе законов механики для каждого случая число пуль, проходящих сквозь ящик без соударений, и угловое распределение отклоняющихся пуль. Тогда вывод о форме и расположении камушков в ящике можно сделать, сравнив результаты расчета с результатами измерений.

Если в нашей аллегории заменить слово «пуля» словами «квант света», «электрон», «нейтрон», «протон», а вместо камушков в деревянном ящике думать об атомах, молекулах, ядрах, элементарных частицах,

то окажется, что мы говорим о современных способах обращения с указанными объектами. При этом в роли пистолета выступает циклотрон или какой-либо другой ускоритель частиц.

В любой области физики — будь то физика элементарных частиц, ядерная физика или физика конденсированного состояния вещества — почти все эксперименты в сущности сводятся к тому, что на изучаемый объект заставляют падать какие-нибудь частицы



Фиг. 1. Рассеяние пуль на мелких камнях в деревянном ящике

и исследуют распределение рассеянных частиц. При таком взгляде на вещи становится очевидным важное значение теории рассеяния для современной физики.

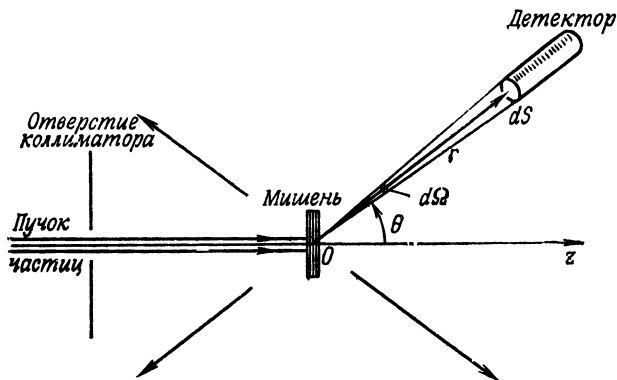
Определим теперь физическую величину, наблюдаемую в таких экспериментах. Пусть, как показано на фиг. 2, классическая или квантовая частица, падая на мишень, рассеивается ею. В эксперименте непосредственно измеряют число частиц, рассеянных в некоторое место, достаточно удаленное от расположенной в начале координат мишени. Пусть N — число падающих частиц, проходящих в одну секунду через единичную площадку в направлении оси z , а ΔN — число рассеиваемых частиц, проходящих через площадку dS в одну секунду, т. е. интенсивность потока частиц, падающих по нормали на элемент dS сферической поверхности радиусом r с центром в начале координат O . Имеем

$$\Delta N \propto N dS/r^2.$$

Вводя телесный угол $d\Omega = dS/r^2$, под которым площадка dS видна из начала координат O , можно написать

$$\Delta N = \sigma(\theta) N d\Omega, \quad (1.1)$$

где коэффициент пропорциональности $\sigma(\theta)$ — функция угла θ , показанного на фиг. 2. Угол θ называют *углом рассеяния*. Из формулы (1.1) ясно, что $\sigma(\theta)$ —



Фиг. 2. Схема типичного эксперимента по рассеянию частиц. Стрелками изображены рассеянные частицы.

доля числа частиц, рассеиваемых в единичный телесный угол в направлении угла рассеяния θ при условии, что в падающем пучке в одну секунду через единичную поверхность проходит одна частица. Величина $\sigma(\theta)$ имеет размерность площади, так как $[N] = \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, а $[\Delta N] = \text{с}^{-1}$. Поэтому ее называют *дифференциальным сечением* рассеяния. Интеграл от $\sigma(\theta)$ по телесному углу называют *полным сечением* рассеяния:

$$\sigma^{\text{полн}} = \int \sigma(\theta) d\Omega. \quad (1.2)$$

Полное сечение показывает, какая доля падающих частиц рассеивается при условии, что на единицу площади в единицу времени падает одна частица. Пусть мишень — небольшой диск. Если на него падают

классические частицы, то полное сечение их рассеяния равно площади диска. Аналогично, если для борковского радиуса атома принять значение $a_0 = 5,29 \times 10^{-9}$ см, то полное сечение рассеяния электронов на атоме по порядку величины будет $\sigma^{\text{полн}} \sim a_0^2 = 2,80 \times 10^{-17}$ см². Если же мишень — атомное ядро или элементарная частица, то по порядку величины сечение рассеяния составляет 10^{-24} см². Поэтому в ядерной физике и физике элементарных частиц в качестве единицы измерения сечения рассеяния пользуются величинами

$$1 \text{ б} = 1 \text{ барн} \quad \equiv 10^{-24} \text{ см}^2,$$

$$1 \text{ мб} \equiv 1 \text{ миллибарн} \equiv 10^{-27} \text{ см}^2.$$

Разумеется, отдельные атомы или атомные ядра не могут быть мишенями в реальном эксперименте. В качестве мишеней применяют тонкие пластинки вещества, состоящие из огромного числа атомов или молекул. Пусть в точке, находящейся внутри мишени на расстоянии z см от поверхности, число падающих частиц равно $N(z)$ см⁻²·с⁻¹. Тогда число частиц, выходящих из пучка за счет рассеяния в слое вещества от z до $z + dz$, будет равно

$$n\sigma^{\text{полн}}N(z)dz.$$

Здесь n — плотность числа частиц мишени. Если мишень достаточно толстая, падающие частицы могут совершить внутри ее последовательно одно, два, три соударения, т. е. может происходить *многократное рассеяние*. Тогда число рассеянных частиц не будет пропорционально толщине мишени. Чтобы предотвратить это, мишени делают достаточно тонкими. Пусть в точке $z + dz$ такой тонкой мишени число частиц, еще не рассеянных и сохраняющих направление движения падающего пучка, будет $N(z + dz)$. Имеем

$$N(z + dz) = N(z) - n\sigma^{\text{полн}}N(z)dz.$$

Это эквивалентно дифференциальному уравнению

$$\frac{dN(z)}{dz} = -n\sigma^{\text{полн}}N(z),$$

решая которое, получаем для числа частиц $N(z)$ на глубине z выражение

$$N(z) = N(0) \exp(-n\sigma^{\text{полн}}z), \quad (1.3)$$

где $N(0)$ — число частиц, падающих на поверхность мишени (при $z = 0$). Таким образом, полное сечение рассеяния $\sigma^{\text{полн}}$ можно определить экспериментально, измерив число частиц $N(z)$, проходящих через мишень без соударений в направлении оси z , при всевозможных толщинах мишени z . Такой метод измерения полного сечения называют *методом ослабления*.

Дифференциальное сечение $\sigma(\theta)$ можно определить, измерив относительную плотность потока рассеянных частиц при разных углах рассеяния θ . Сумма дифференциальных сечений по всем телесным углам должна равняться полному сечению.

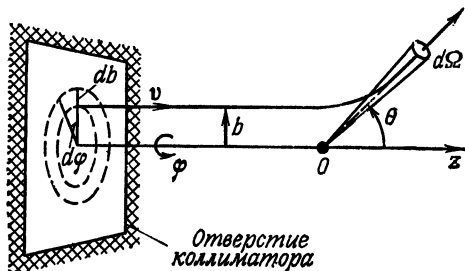
Из сказанного ясно, что цель теории рассеяния — теоретический расчет сечений.

§ 2. Теория рассеяния в классической механике

В качестве первого шага целесообразно рассмотреть теорию рассеяния в классической механике. Тогда станут понятнее особенности квантовомеханических задач рассеяния.

Пусть классическая частица рассеивается на потенциале, сферически-симметричном относительно начала координат O . Этот случай показан на фиг. 3. Траектория классической частицы после прохождения ею прямоугольного отверстия полностью определяется ее положением и скоростью в плоскости отверстия. (В противоположность этому в силу соотношения неопределенностей положение квантовой частицы в плоскости отверстия неизвестно, если точно определена ее скорость.) Если скорость v падающей классической частицы до рассеяния задана, то направление рассеяния полностью определяется показанным на фиг. 3 расстоянием b от траектории падающей частицы до

оси z . В конечном итоге угол рассеяния θ оказывается функцией расстояния b . И наоборот, можно считать, что b есть функция угла θ , т. е. $b = b(\theta)$. Величину b называют *прицельным расстоянием* или *параметром удара*. Ясно, что частицы, рассеянные в малый телесный угол $d\Omega$ в направлении θ , прошли сквозь отверстие через бесконечно малый элемент площади $b db d\varphi$, где φ — азимутальный угол относительно оси z .



Фиг. 3. Рассеяние в классической механике.

Если на единицу площади отверстия в одну секунду падает одна частица, то вероятность прохождения в единицу времени через элемент площади отверстия $b db d\varphi$ равна площади $b db d\varphi$ этого элемента. Поэтому

$$d\sigma = b db d\varphi = b\theta \frac{db(\theta)}{d\theta} d\theta d\varphi.$$

Написанное выражение дает вероятность рассеяния в бесконечно малый телесный угол $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$. Следовательно, вероятность рассеяния в единицу телесного угла, т. е. сечение рассеяния $\sigma(\theta)$, выражается формулой

$$\sigma(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{\sin \theta} b(\theta) \frac{db(\theta)}{d\theta}. \quad (2.1)$$

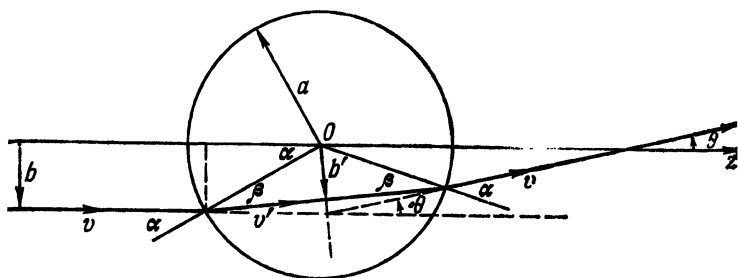
Итак, в классической механике дифференциальное сечение можно рассчитать по формуле (2.1), если предварительно определить функцию траектории $b(\theta)$.

А. Рассеяние на потенциальной яме

Применим изложенную выше общую теорию рассеяния к случаю рассеяния классической частицы массы m на сферической потенциальной яме радиусом r с центром в начале координат O :

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{при } r < a; \\ 0 & \text{при } r > a. \end{cases} \quad (2.2)$$

По определению $V_0 > 0$. Обозначим через v скорость падающей частицы, а через b — ее прицельное рас-



Фиг. 4. Рассеяние классических частиц на потенциальной яме.

стояние. Пусть скорость частицы внутри потенциальной ямы будет v' , а расстояние от начала координат до траектории частицы в яме обозначим через b' . Закон сохранения энергии дает

$$\frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} mv'^2 - V_0. \quad (2.3)$$

Кроме того, согласно закону сохранения момента количества движения относительно начала координат O ,

$$mvb = mv'b'. \quad (2.4)$$

Из уравнения (2.3) получаем

$$v' = \sqrt{v^2 + \frac{2V_0}{m}}.$$

Пусть α — угол падения частицы на поверхность потенциальной ямы, а β — угол преломления. Как видно

из фиг. 4, можно написать

$$b = a \sin \alpha, \quad b' = a \sin \beta. \quad (2.5)$$

Следовательно,

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{b}{b'}.$$

Учитывая равенство (2.4), получаем закон преломления частицы на границе потенциальной ямы:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{v'}{v} = \frac{\sqrt{v^2 + 2V_0/m}}{v} > 1. \quad (2.6)$$

Сравним эту формулу с законом преломления света. Обозначим скорость света в вакууме через v , а в среде — через v' ($v > v'$). Закон преломления света имеет вид

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{v}{v'},$$

обратный закону (2.6)¹⁾.

Из фиг. 4 ясна формула

$$\theta = 2(\alpha - \beta), \quad (2.7)$$

которая позволяет связать угол рассеяния θ с прицельным расстоянием b (2.5). Сначала, пользуясь формулой (2.7), напомним

$$\sin \alpha = \sin \left(\frac{\theta}{2} + \beta \right).$$

Вводя обозначение $\gamma \equiv v'/v$ и исключая угол преломления с помощью (2.6), получаем

$$\sin^2 \alpha = \frac{\gamma^2 \sin^2 (\theta/2)}{\gamma^2 - 2\gamma \cos (\theta/2) + 1}.$$

Подставляя это выражение в первую из формул (2.5), находим

$$b^2(\theta) = a^2 \sin^2 \alpha = \frac{a^2 \gamma^2 \sin^2 (\theta/2)}{\gamma^2 - 2\gamma \cos (\theta/2) + 1}. \quad (2.8)$$

Формулу (2.1) можно, в частности, переписать в виде

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} b^2(\theta). \quad (2.9)$$

¹⁾ Отмеченное автором несоответствие обусловлено тем, что в формулу (2.6) входят групповые скорости частиц, а в формулу для закона преломления света — фазовые скорости волн. — *Прим. перев.*

Поэтому, чтобы найти дифференциальное сечение, можно продифференцировать непосредственно выражение (2.8). Получаем

$$\sigma(\theta) = \frac{a^2 \gamma^2}{4 \cos(\theta/2)} \frac{[\gamma - \cos(\theta/2)][1 - \gamma \cos(\theta/2)]}{[\gamma^2 - 2\gamma \cos(\theta/2) + 1]^2}. \quad (2.10)$$

Здесь $\gamma \equiv v'/v > 1$ и $a \geq b \geq 0$. Поэтому угол рассеяния θ в формуле (2.10) ограничен. В указанных пределах величина (2.10) всегда положительна. Полное сечение можно найти, проинтегрировав (2.10) по θ , но проще воспользоваться соотношениями (2.5). В самом деле, из фиг. 4 ясно, что угол падения α изменяется от 0 до $\pi/2$. Следовательно,

$$\sigma_{\text{полн}} = 2\pi \int_0^a b db = 2\pi a^2 \int_0^{\pi/2} \sin \alpha \cos \alpha d\alpha = \pi a^2. \quad (2.11)$$

Это совпадает с геометрическим поперечным сечением прямоугольной ямы.

Б. Резерфордское рассеяние

Резерфордским называют рассеяние α -частиц на тяжелых ядрах. Рассмотрим это явление на основе классической механики. Пусть масса ядра гораздо больше массы m α -частицы. Тогда можно считать, что до и после столкновения с α -частицей ядро покоится¹⁾. Между тяжелым ядром с зарядом Ze и α -частицей, заряд которой равен Q , действует кулоновская сила отталкивания. Хорошо известно, что в классической механике рассеиваемая α -частица движется по гиперболе. На фиг. 5 эта гипербола обозначена буквой H . Точка K на чертеже указывает положение ядра, это фокус гиперболы H' , показанной на чертеже справа пунктиром. Зная свойства гиперболы, можно написать $\overline{OA} = \overline{OL} = a$, $\overline{AB} = \overline{LK} = b$. Тогда

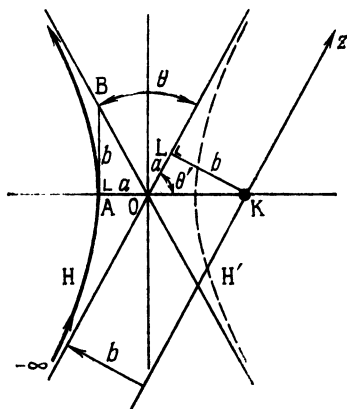
$$\overline{OK} \equiv \epsilon = \sqrt{a^2 + b^2}, \quad \overline{AK} \equiv l = a + \epsilon.$$

¹⁾ Так как скорость ядра отдачи гораздо меньше скорости налетающей частицы. — *Прим. ред.*

Кроме того, $a = \varepsilon \cos \theta'$ и $b = \varepsilon \sin \theta'$. Из этих соотношений следует, что

$$l = \varepsilon (1 + \cos \theta') = b \frac{1 + \cos \theta'}{\sin \theta'} = b \operatorname{ctg} \frac{\theta'}{2}. \quad (2.12)$$

Здесь b — прицельное расстояние α -частицы.



Фиг. 5. Резерфордское рассеяние.

Законы сохранения энергии и момента количества движения, записанные в точке отверстия (на фиг. 5 точка — ∞) и в точке A , дают

$$\frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} mv_A^2 + \frac{ZeQ}{l}, \quad (2.13)$$

$$mvb = mv_A l. \quad (2.14)$$

Здесь v — скорость падающей частицы до рассеяния, а v_A — ее скорость в точке A . Исключая из формул (2.12) — (2.14) величины l и v_A , получаем

$$b = \frac{ZeQ}{mv^2} \operatorname{tg} \theta' = \frac{ZeQ}{mv^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}. \quad (2.15)$$

В последнем из равенств (2.15) использовано соотношение $\theta' = (\pi - \theta)/2$. Подставляя (2.15) в (2.1), находим дифференциальное сечение рассеяния:

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{ZeQ}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (2.16)$$

Дифференциальное сечение (2.15) велико при малом θ , т. е. для рассеяния вперед, и при $\theta = 0$ оно обращается в бесконечность. Ввиду этого интеграл (2.16) по телесному углу расходится. Причина расходимости состоит в том, что кулоновская сила отталкивания действует на α -частицу, как бы далеко та ни находилась от ядра. В действительности же вблизи атомных ядер всегда имеются электроны, «экранирующие» положительный заряд ядра, в результате чего на α -частицу, находящуюся даже на сравнительно небольшом расстоянии¹⁾ от ядра мишени, не действуют кулоновские силы. Если учесть такое экранирование, то дифференциальное сечение рассеяния вперед становится ограниченным и полное сечение не расходится.

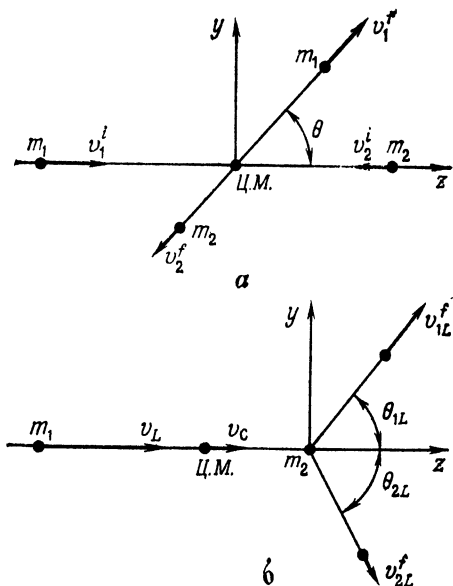
§ 3. Лабораторная система и система центра масс

В опытах по рассеянию часто встречается случай, показанный на фиг. 2, когда частицы падают на неподвижную мишень. Такую систему отсчета, в которой до столкновения частицы мишени покоятся, называют *лабораторной*. С теоретической точки зрения, однако, удобнее рассматривать движение центра масс падающей частицы и частицы мишени отдельно от их относительного движения. Дело в том, что число степеней свободы, равное шести в системе двух частиц, сокращается до трех в системе одной частицы, возникающей после отделения движения центра масс. Поэтому теоретическое рассмотрение движения стремятся проводить в системе отсчета, в которой центр масс покоится. Ее называют *системой центра масс*. Многие результаты теории рассеяния получены в этой системе отсчета. Поэтому сравнивать их с экспериментальными данными можно только после того, как сечения рассеяния, рассчитанные в системе

¹⁾ Превышающем радиус экранирования. — *Прим. ред.*

центра масс, пересчитаны к лабораторной системе ¹⁾. Разъясним метод такого пересчета.

Движение частиц с массами m_1 и m_2 в системе центра масс показано на фиг. 6, а. Сначала частицы



Фиг. 6. Система центра масс (а) и лабораторная система (б).
Ц. М. — центр масс.

сближаются со скоростями, удовлетворяющими условию равенства нулю полного импульса системы, а затем, испытав столкновение, расходятся, и при этом скорости частиц вновь удовлетворяют условию равенства нулю полного импульса системы. Пусть до рассеяния частицы движутся вдоль оси z , сближаясь со

¹⁾ Имеются в виду данные, полученные на покоящейся мишени. В случае экспериментов, проводимых со встречными пучками одинаковых частиц равной энергии, экспериментальные данные, естественно, получают прямо в системе центра масс.— *Прим. ред.*

скоростями v_1^i и v_2^i , а после столкновения разлетаются от оси z со скоростями v_1^f и v_2^f . Тогда по закону сохранения импульса

$$m_1 v_1^f - m_2 v_2^f = m_1 v_1^i - m_2 v_2^i = 0. \quad (3.1)$$

Так как частицы не взаимодействуют в областях пространства, достаточно удаленных от точки соударения, то по закону сохранения энергии

$$\frac{1}{2} m_1 (v_1^f)^2 + \frac{1}{2} m_2 (v_2^f)^2 = \frac{1}{2} m_1 (v_1^i)^2 + \frac{1}{2} m_2 (v_2^i)^2. \quad (3.2)$$

Теперь рассмотрим лабораторную систему, в которой частица 2 покоится, а частица 1 до столкновения движется со скоростью v_L в положительном направлении оси z . Для простоты положим, что $m_2 \geq m_1$. Следовательно, вначале полный импульс системы равен $m_1 v_L$. Поэтому скорость движения центра масс двух частиц такова:

$$v_C = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_L.$$

Следовательно, выполняются следующие соотношения между скоростями двух частиц в системе центра масс и их скоростями в лабораторной системе:

$$\begin{aligned} v_1^i &= v_L - v_C = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_L, \\ v_2^i &= -v_C = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} v_L. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Из формул (3.1)–(3.3) можно получить скорости двух частиц в системе центра масс после столкновения:

$$v_1^f = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_L, \quad v_2^f = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_L. \quad (3.4)$$

Обозначим угол рассеяния в системе центра масс через θ . Тогда y - и z -компоненты векторов скорости

частиц в системе центра масс равны

$$\begin{aligned}
 v_{1,y}^i &= v_1^i \sin \theta = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_L \sin \theta, \\
 v_{1,z}^i &= v_1^i \cos \theta = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_L \cos \theta, \\
 v_{2,y}^f &= -v_2^f \sin \theta = \frac{-m_1}{m_1 + m_2} v_L \sin \theta, \\
 v_{2,z}^f &= -v_2^f \cos \theta = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} v_L \cos \theta.
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Чтобы получить y - и z -компоненты векторов скорости в лабораторной системе после столкновения, надо к z -компоненте скорости в системе центра масс добавить скорость центра масс v_C . То есть

$$\begin{aligned}
 v_{1L,y}^f &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_L \sin \theta, \\
 v_{1L,z}^f &= \frac{m_1 + m_2 \cos \theta}{m_1 + m_2} v_L, \\
 v_{2L,y}^f &= -\frac{m_1}{m_1 + m_2} v_L \sin \theta, \\
 v_{2L,z}^f &= \frac{m_1 - m_1 \cos \theta}{m_1 + m_2} v_L.
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Пусть углы рассеяния первой и второй частиц в лабораторной системе будут θ_{1L} и θ_{2L} . Тогда

$$\begin{aligned}
 \operatorname{tg} \theta_{1L} &= \frac{v_{1L,y}^f}{v_{1L,z}^f} = \frac{\sin \theta}{\tau + \cos \theta}, \\
 \operatorname{tg} \theta_{2L} &= \frac{v_{2L,y}^f}{v_{2L,z}^f} = -\frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta}.
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Здесь $\tau \equiv m_1/m_2 \leq 1$. Формулы (3.7) выражают связь между углами рассеяния в системе центра масс и в лабораторной системе. Их можно также преобразовать к виду

$$\cos \theta_{1L} = \frac{\tau + \cos \theta}{\sqrt{1 + 2\tau \cos \theta + \tau^2}}. \tag{3.8}$$

Пусть сечение рассеяния частицы 1 в телесный угол $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ в системе центра масс равно

$\sigma(\theta) d\Omega$, а сечение рассеяния той же частицы в телесный угол $d\Omega_{1L} = \sin \theta_{1L} d\theta_{1L} d\varphi_{1L}$ в лабораторной системе — $\sigma(\theta_{1L}) d\Omega_{1L}$. Телесные углы $d\Omega$ и $d\Omega_{1L}$ соответствуют одной и той же области в разных системах отсчета. Следовательно, число частиц, рассеиваемых в эту область, не зависит от системы отсчета:

$$\sigma(\theta_{1L}) d\Omega_{1L} = \sigma(\theta) d\Omega. \quad (3.9)$$

В нашем случае $d\varphi_{1L} = d\varphi$, откуда

$$\frac{d\Omega_{1L}}{d\Omega} = \frac{d \cos \theta_{1L}}{d \cos \theta}. \quad (3.10)$$

Подставляя (3.8) в (3.10) и выполняя дифференцирование, получаем соотношение между сечениями рассеяния в системе центра масс и лабораторной системе

$$\sigma(\theta_{1L}) = \sigma(\theta) \frac{(1 + 2\tau \cos \theta + \tau^2)^{2/3}}{1 + \tau \cos \theta}. \quad (3.11)$$

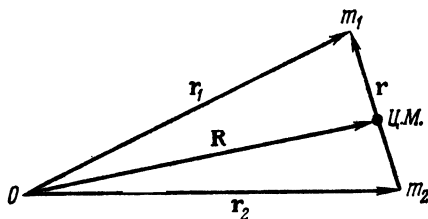
Из формулы (3.8) видно, что при $m_2 \gg m_1$, т. е. при $\tau \ll 1$, имеет место равенство $\cos \theta_{1L} \approx \cos \theta$, или $\theta_{1L} \approx \theta$. В этом случае угол рассеяния в лабораторной системе почти равен углу рассеяния в системе центра масс. Это естественно¹⁾. В то же время при $m_1 = m_2$ имеем $\cos \theta_{1L} = \cos(\theta/2)$, т. е. $\theta_{1L} = \theta/2$. Следовательно, при изменении угла θ от нуля до π угол в лабораторной системе изменяется от 0 до $\pi/2$. Таким образом, максимальный угол рассеяния в лабораторной системе равен 90° .

¹⁾ Поскольку в этом случае лабораторная система практически совпадает с системой центра масс. — *Прим. ред.*

Стационарная теория рассеяния

§ 1. Выделение движения центра масс в системе двух частиц

Лабораторной системой отсчета удобно пользоваться лишь в случае бесконечно тяжелой мишени. В противоположном же случае систему «рассеиваемая частица — мишень» с самого начала нужно трактовать как систему двух частиц, и тогда, как указывалось в гл. 1, § 3, удобнее перейти к системе центра масс. Займемся этим.



Фиг. 7. Координаты центра масс и относительные координаты.

Пусть массы частиц равны m_1 и m_2 , а потенциал V действующих между ними сил — функция расстояния между частицами. Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r_1, r_2; t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + V(|r_1 - r_2|) \right] \psi(r_1, r_2; t), \quad (1.1)$$

где r_1 и r_2 — радиус-векторы частиц, показанные на фиг. 7.

Радиус-вектор R центра масс и вектор r расстояния между частицами определяются формулами

$$R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}, \quad r = r_1 - r_2. \quad (1.2)$$

Чтобы переписать уравнение Шредингера (1.1) в переменных \mathbf{R} и \mathbf{r} , в принципе нужно было бы произвести замену переменных по формулам (1.2). Но такие выкладки оказываются неожиданно громоздкими и не очень наглядными, особенно в случае используемых ниже более сложных систем координат. Поэтому мы рассмотрим на примере преобразования (1.2) более общий и более прозрачный метод, применимый в любых, самых сложных случаях.

Пусть $\dot{\mathbf{r}} \equiv d\mathbf{r}/dt$. Лагранжиан системы, описываемой уравнением (1.1), имеет вид

$$L = \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2}{2} - V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (1.3)$$

а импульсы, канонически сопряженные координатами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , таковы:

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_1} = m_1 \dot{\mathbf{r}}_1, \quad \mathbf{p}_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}_2} = m_2 \dot{\mathbf{r}}_2. \quad (1.4)$$

Продифференцируем (1.2) по времени:

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2}{m_1 + m_2}, \quad \dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{r}}_1 - \dot{\mathbf{r}}_2. \quad (1.5)$$

Решая систему уравнений (1.5) относительно $\dot{\mathbf{r}}_1$ и $\dot{\mathbf{r}}_2$ и подставляя результат в формулу (1.3), получаем

$$L = \frac{1}{2} M \dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\mathbf{r}}^2 - V(|\mathbf{r}|). \quad (1.6)$$

Введем импульсы, канонически сопряженные координатам \mathbf{R} и \mathbf{r} :

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = M \dot{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{p}_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\mathbf{r}}. \quad (1.7)$$

Здесь $M = m_1 + m_2$. Подставляя выражения (1.5) в правые части равенств (1.7) и учитывая формулы (1.4), приходим к соотношению между каноническими импульсами

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{p}_r = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}. \quad (1.8)$$

Пока что мы оперировали со всеми величинами как с c -числами, т. е. так, как будто это классические величины. Учтем теперь их квантовый характер (то, что они q -числа), т. е. учтем канонические перестановочные соотношения. Для старых переменных \mathbf{r}_1 , \mathbf{p}_1 и \mathbf{r}_2 , \mathbf{p}_2 эти соотношения имеют вид

$$[\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1] = [\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2] = i\hbar \quad (1.9)$$

(в остальных перестановочных соотношениях в правой части стоит нуль). С помощью формул (1.2) и (1.8) выводим коммутаторы новых пар переменных \mathbf{R} , \mathbf{P} и \mathbf{r} , \mathbf{p}_r :

$$[\mathbf{R}, \mathbf{P}] = [\mathbf{r}, \mathbf{p}_r] = i\hbar \quad (1.10)$$

(остальные пары переменных коммутируют между собой). Таким образом, преобразования (1.2) и (1.8) сохраняют неизменными перестановочные соотношения, т. е. это — канонические преобразования.

Гамильтониан правой части уравнения (1.1) в канонических переменных \mathbf{p}_1 , \mathbf{r}_1 и \mathbf{p}_2 , \mathbf{r}_2 имеет вид

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (1.11)$$

Преобразуя его на основе соотношений (1.2) и (1.8), получаем

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_r^2}{2m} + V(|\mathbf{r}|), \quad (1.12)$$

где m — *приведенная масса*, которая определяется равенством

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}. \quad (1.13)$$

Система с гамильтонианом (1.12) отвечает уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}; t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V(|\mathbf{r}|) \right] \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}; t). \quad (1.14)$$

Это — искомое уравнение, записанное в координатах центра масс и относительных координатах.

Если в уравнение (1.14) подставить

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}; t) = \\ = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp\left[-i\left(\frac{\mathbf{P}'^2}{2M} + E\right)\frac{t}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{i\mathbf{P}' \cdot \mathbf{R}}{\hbar}\right] \psi(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.15)$$

то для $\psi(\mathbf{r})$ получим уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V(r)\right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.16)$$

Здесь \mathbf{P}' — собственное значение оператора импульса \mathbf{P} , а $\exp(i\mathbf{P}' \cdot \mathbf{R}/\hbar)$ — плоская волна, соответствующая движению центра масс с импульсом \mathbf{P}' . В уравнение (1.16) входит только вектор \mathbf{r} , зависящий лишь от относительных координат. Тем самым движение центра масс отделено от относительного движения. По форме уравнение (1.16) полностью аналогично уравнению Шредингера для одной частицы, которая движется в поле с потенциалом V , зависящим только от пространственных координат. Под массой m в уравнении (1.16) подразумевается приведенная масса (1.13).

§ 2. Интегральное уравнение рассеяния

Возможны два подхода к анализу рассеяния — стационарный и нестационарный. Их можно пояснить следующей классической аналогией. Пусть из шланга хлещет вода. Преградим ей путь тяжелым камнем. Ударившись о камень, струя воды разлетится во все стороны. Если вода течет очень долго, то картина явления будет стационарной и ее можно сфотографировать. Фотография, показывающая не изменяющуюся с течением времени картину рассеяния падающей воды камнем, символизирует стационарный подход к рассеянию. Другой, нестационарный подход — следить за отдельной капелькой воды, вылетающей из шланга, отмечая, как она движется во времени в ходе рассеяния.

Исходный пункт квантовой теории рассеяния — уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (2.1)$$

При первом из указанных выше подходов вместо уравнения (2.1) рассматривают стационарное уравнение

$$H\psi = E\psi, \quad (2.2)$$

решая его при соответствующих граничных условиях. С математической точки зрения, такая задача в сущности не отличается от задачи о рассеянии классических волн, например рассеяния звука твердым телом. Единственное различие в том, что квантовая волновая функция дает вероятность, а классическая волна имеет смысл колебаний плотности вещества. Вторым из указанных выше подходов (нестационарный) в квантовой механике состоит в следующем. Рассматривают начальное состояние, в котором падающая частица и мишень находятся далеко друг от друга. Под влиянием взаимодействия между частицами состояние изменяется с течением времени согласно уравнению Шредингера (2.1). Решая его, находят вероятность того, что по прошествии некоторого времени это состояние будет заключать в себе другие наблюдаемые состояния, т. е. вычисляют вероятность перехода из начального в конечное состояние. Вторым подход более, чем первый, соответствует специфике квантовомеханического способа мышления и обладает большей общностью. Но ответ на вопрос, согласуются ли друг с другом результаты, получаемые при двух разных подходах, отнюдь не самоочевиден.

В данной главе мы примем для квантовой теории рассеяния первый подход. Нестационарная же теория, основанная на втором подходе, будет изложена в гл. 4 и 5.

Стационарные задачи в квантовой механике разделяются на два класса. Первый класс — задачи на собственные значения. В этом случае ищут решения уравнения (2.2), обращаемые в нуль на бесконечности. Собственные значения энергии E не могут быть любыми, они принимают только некоторые разрешенные значения E_n . Задачу определения собственных значений и отвечающих им собственных функций называют задачей на собственные значения. Ко второму классу стационарных задач квантовой механики

относятся задачи рассеяния. В отличие от задачи на собственные значения в задаче рассеяния энергия системы определена заранее экспериментальной ситуацией как энергия, которую имеют падающая частица и мишень. Задача состоит в решении дифференциального уравнения (2.2) при граничных условиях, отвечающих рассеянию.

Перейдем к рассмотрению взаимного рассеяния (столкновения) двух частиц в системе центра масс. Исходный пункт этой задачи — уравнение Шредингера (1.16). Энергия E задана экспериментальной ситуацией. Она, естественно, положительна. Введем обозначения

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad U = \frac{2mV}{\hbar^2}, \quad (2.3)$$

где $k = |\mathbf{k}|$ — волновое число. В этих обозначениях уравнение (1.16) примет вид

$$(\Delta + k^2) \psi_k(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

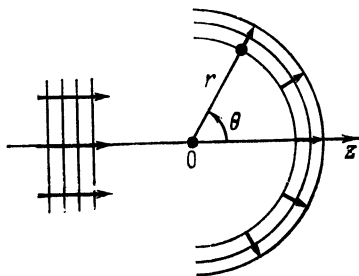
Если в правой части принять $U = 0$, то мы придем к хорошо известному в классической физике *уравнению Гельмгольца*. Будем считать, что потенциал $V(r)$ — функция только расстояния $r = |\mathbf{r}|$, достаточно быстро стремящаяся к нулю при больших r . Случай, когда на бесконечности потенциал убывает медленно, подобно кулоновскому потенциалу, рассматривать не будем. В случае кулоновского потенциала уравнение (2.4) решается строго (решение подробно излагается во всех учебниках квантовой механики), но соответствующие методы решения не приложимы к задачам с другими потенциалами.

Дифференциальное уравнение (2.4) нужно дополнить граничным условием, соответствующим заданной картине рассеяния. Картина рассеяния показана на фиг. 8. В местах, достаточно удаленных от центра потенциала O , волновая функция состоит из плоской волны, распространяющейся в положительном направлении оси z , и сферической волны, расходящейся от точки O как от центра. Следовательно, на

бесконечном удалении от центра асимптотика волновой функции имеет вид

$$\psi_k(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \left[\exp(ikz) + \frac{f(\theta)}{r} \exp(ikr) \right]. \quad (2.5)$$

Это и есть граничное условие для задачи рассеяния. Уравнение (2.4) нужно решать при условии (2.5). Здесь $f(\theta)$ — амплитуда рассеянной волны, обычно



Фиг. 8. Граничные условия на бесконечности для задачи рассеяния.

Слева — плоская волна падающих частиц, справа — расходящаяся сферическая волна.

зависящая от угла θ . Ее называют *амплитудой рассеяния*. Каков смысл плоской волны (первое слагаемое) и расходящейся сферической волны [второе слагаемое в формуле (2.5)], можно понять, приняв во внимание множитель $\exp(-iEt/\hbar)$ в выражении (1.15). Коэффициент $(2\pi)^{-3/2}$ в условии (2.5) соответствует *условию нормировки* падающей плоской волны на δ -функцию

$$(2\pi)^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}\} d^3\mathbf{r} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (2.6)$$

при котором в кубе объемом $(2\pi)^3 \text{ см}^3$ содержится одна частица:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} dx \int_0^{2\pi} dy \int_0^{2\pi} dz |\exp(ikz)|^2 = 1. \quad (2.7)$$

Вернемся к дифференциальному уравнению (2.4). Будем теперь считать его правую часть отличной от нуля. Тогда его решение представится суммой общего решения уравнения Гельмгольца

$$(\Delta + k^2) \phi_k(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.8)$$

и частного решения $\chi_k(\mathbf{r})$ неоднородного уравнения

$$(\Delta + k^2) \chi_k(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

Чтобы решить уравнение (2.9), рассмотрим дифференциальное уравнение

$$(\Delta + k^2) G_0(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

Пусть его решение будет $G_0(\mathbf{r})$. Тогда решение уравнения (2.9) можно записать в виде

$$\chi_k(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}'). \quad (2.11)$$

Очевидно, что

$$(\Delta + k^2) \chi_k(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}') = U(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}).$$

Следовательно, величина χ_k , определенная формулой (2.11), удовлетворяет уравнению (2.9). Величину $G_0(\mathbf{r})$ называют *функцией Грина*.

Чтобы решить уравнение (2.10), представим функции в обеих его частях в виде интегралов Фурье:

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{r}) &= \int G_0(\mathbf{k}') \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{k}', \\ \delta^3(\mathbf{r}) &= (2\pi)^{-3} \int \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{k}'. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Подставляя эти разложения в уравнение (2.10), получаем

$$(k^2 - k'^2) G_0(\mathbf{k}') = (2\pi)^{-3},$$

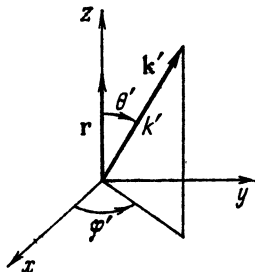
откуда с учетом первого из выражений (2.12) находим

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k}' \frac{\exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}{k^2 - k'^2}. \quad (2.13)$$

Для вычисления интеграла в правой части выбираем ось z в направлении \mathbf{r} , как показано на фиг. 9. Перейдя к сферическим координатам (k', θ', φ') в пространстве \mathbf{k}' , получим

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k'^2 dk' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} \frac{\exp(ik'r \cos \theta')}{k^2 - k'^2} d\varphi' = \\ = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{k' \sin k'r}{k^2 - k'^2} dk'. \quad (2.14)$$

Интеграл по k' содержит полюс в точке $k' = k$; поэтому сам по себе он не имеет смысла и для определения $G_0(\mathbf{r})$ необходимо установить правила обхода



Фиг. 9. Сферические координаты.

полюса. Для этого прежде всего, учитывая, что подынтегральная функция четна относительно k' , перепишем последний из интегралов (2.14) в виде

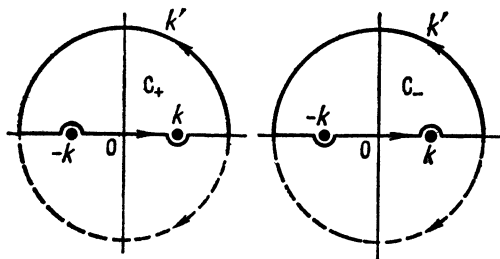
$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k' \sin k'r}{k^2 - k'^2} dk' = -\frac{1}{16\pi^2 i r} (I_1 - I_2), \quad (2.15)$$

где

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{k' + k} + \frac{1}{k' - k} \right) \exp(ik'r) dk', \quad (2.16)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{k' + k} + \frac{1}{k' - k} \right) \exp(-ik'r) dk'. \quad (2.17)$$

Интегралы I_1 и I_2 имеют полюса в двух точках $k' = \pm k$. Поэтому, рассматривая плоскость комплексного переменного k' , изменим пути интегрирования, направив их по замкнутым контурам, показанным на фиг. 10. Возможны различные способы обхода полюсов. В случае интеграла I_1 путь интегрирования замкнем в верхней полуплоскости (сплошные линии) и обойдем полюса двумя способами (контур C_+ и C_-).



Фиг. 10. Пути интегрирования C_+ и C_- в плоскости комплексного переменного k' .

Тогда для интеграла I_1 вычеты дадут

$$I_1 = 2\pi i \exp(ikr) \quad (\text{контур } C_+),$$

$$I_1 = 2\pi i \exp(-ikr) \quad (\text{контур } C_-).$$

В интеграле I_2 путь интегрирования замыкаем в нижней полуплоскости (пунктир). Тогда

$$I_2 = -2\pi i \exp(ikr) \quad (\text{контур } C_+),$$

$$I_2 = -2\pi i \exp(-ikr) \quad (\text{контур } C_-).$$

Таким образом, выражение (2.15) принимает вид

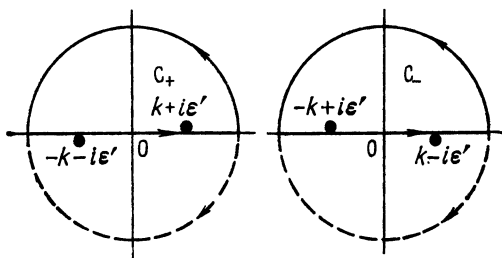
$$G_0^{(\pm)}(r) = -\frac{1}{4\pi r} \exp(\pm ikr), \quad (2.18)$$

где знак зависит от пути интегрирования. В этой формуле $G_0^{(+)}$ отвечает пути C_+ , а $G_0^{(-)}$ — пути C_- . Иначе говоря, контуру C_+ отвечает функция Грина в виде расходящейся сферической волны, а контуру C_- — в виде сходящейся. Вместо того чтобы обходить полюса, лежащие на действительной оси, можно

сместить их так, как показано на фиг. 11. Тогда, положив $k' = \pm(k + i\varepsilon')$, $\varepsilon' \rightarrow 0^+$, для контура C_+ получим результат, совпадающий с (2.18). Если ввести $\varepsilon = 2\varepsilon'k$, то можно написать

$$k'^2 = (k + i\varepsilon')^2 \approx k^2 + 2i\varepsilon'k = k^2 + i\varepsilon.$$

Для контура C_- нужно принять $k' = \pm(k - i\varepsilon')$.



Фиг. 11. Смещение полюсов.

Тогда $k'^2 = k^2 - i\varepsilon$. С учетом этих определений интегрирование (2.13) даст ¹⁾

$$G_0^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}{k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon} d^3\mathbf{k}' = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ikr)}{r}. \quad (2.19)$$

Если в качестве решения однородного уравнения (2.8) выбрать плоскую волну, распространяющуюся вдоль оси z :

$$\phi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(ikz),$$

то решение уравнения (2.4), отвечающее расходящейся сферической волне, запишется в виде

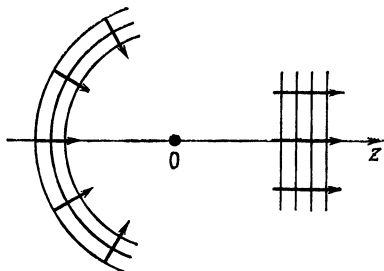
$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(ikz) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp\{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(r') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}', \quad (2.20)$$

¹⁾ В дальнейшем символ предельного перехода, имеющийся в формуле (2.19), всегда будем опускать. Это не должно приводить к недоразумениям.

а решение, отвечающее сходящейся сферической волне, — в виде

$$\psi_k^{(-)}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(ikz) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp\{-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(r') \psi_k^{(-)}(r') d^3r'. \quad (2.21)$$

Мы назвали выражения (2.20) и (2.21) решениями уравнения (2.4), но они содержат неизвестную волновую функцию $\psi_k^{(\pm)}(\mathbf{r})$ и потому в действительности еще



Фиг. 12. Граничные условия, которым удовлетворяет интегральное уравнение (2.21).

Слева — сходящаяся сферическая волна, справа — плоская волна.

не являются решениями. Эти равенства — интегральные уравнения, эквивалентные дифференциальному уравнению (2.4) с заданными граничными условиями. Их считают основными уравнениями теории рассеяния.

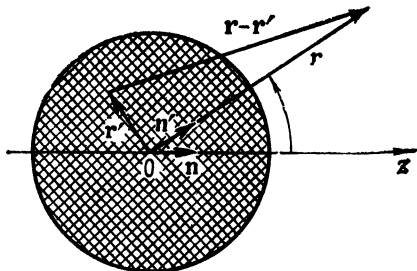
Интегральное уравнение (2.20), как будет показано ниже, удовлетворяет асимптотическим граничным условиям (2.5). Уравнение (2.21) соответствует таким асимптотическим граничным условиям, при которых на бесконечности есть сходящаяся сферическая волна и плоская волна (фиг. 12). Уравнение со сходящейся сферической волной, так же как и уравнение (2.20), находит применение в теории рассеяния.

Соответствие уравнения (2.20) граничному условию (2.5) устанавливаем следующим образом. На фиг. 13 в виде сферы показана область, в которой по-

тенциал V отличен от нуля. Область изменения переменной интегрирования \mathbf{r}' ограничена, очевидно, этой сферой. Следовательно, при $r \rightarrow \infty$ справедливо приближенное выражение

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - (2\mathbf{n}' \cdot \mathbf{r}')r} \approx r - (\mathbf{n}' \cdot \mathbf{r}'),$$

где \mathbf{n}' — единичный вектор в направлении \mathbf{r} . Имеем



Фиг. 13. Асимптотика функции Грина.

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \approx r^{-1} \left\{ 1 + \frac{(\mathbf{n}' \cdot \mathbf{r}')}{r} \right\} \approx r^{-1}.$$

Подставляя это выражение в (2.20), получаем

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \left[\exp(ikz) + \right. \\ \left. + \frac{\exp(ikr)}{r} \left\{ -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int \exp(-ik' \cdot \mathbf{r}') U(r') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Здесь $\mathbf{k}' \equiv k\mathbf{n}'$ — волновой вектор в направлении рассеяния. Очевидно, что выражение (2.22) асимптотически удовлетворяет условию (2.5). Точно так же нетрудно убедиться, что интегральное уравнение (2.21) соответствует граничному условию фиг. 12. Сравнивая (2.22) и (2.5), видим, что для амплитуды рассеяния справедлива формула

$$f(\theta) = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int \exp(-ik' \cdot \mathbf{r}') U(r') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (2.23)$$

Это соотношение наряду с интегральным уравнением (2.20) — одно из наиболее важных в теории рассеяния.

Интегральные уравнения (2.20) и (2.21) можно переписать в форме, применимой к задаче рассеяния более общего вида. Рассмотрим часть гамильтониана H (1.12), остающуюся после отбрасывания членов, отвечающих движению центра масс:

$$H = H_0 + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(r). \quad (2.24)$$

Заметим, что в выражении (2.19)

$$H_0 \exp(ik \cdot r) = E_k \exp(ik \cdot r), \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.25)$$

Тогда выражения (2.20) и (2.21) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \psi_k^{(\pm)} &= (2\pi)^{-1/2} \exp(ikz) + (2\pi)^{-3} \int d^3r' \int d^3k' \frac{1}{E_k - E_{k'} \pm i\epsilon} \times \\ &\quad \times \exp(ik' \cdot r) \exp(-ik' \cdot r') V(r') \psi_k^{(\pm)}(r') = \\ &= (2\pi)^{-1/2} \exp(ikz) + (2\pi)^{-3} \int d^3r' \int d^3k' \frac{1}{E_k - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r\right) \pm i\epsilon} \times \\ &\quad \times \exp(ik' \cdot r) \exp(-ik' \cdot r') V(r') \psi_k^{(\pm)}(r') = \\ &= (2\pi)^{-1/2} \exp(ikz) + (2\pi)^{-3} \frac{1}{E_k - H_0 \pm i\epsilon} \times \\ &\quad \times \int d^3r' \int d^3k' \exp\{ik' \cdot (r - r')\} V(r') \psi_k^{(\pm)}(r') = \\ &\quad = (2\pi)^{-1/2} \exp(ikz) + \\ &\quad + \frac{1}{E_k - H_0 \pm i\epsilon} \int d^3r' \delta^3(r - r') V(r') \psi_k^{(\pm)}(r') = \\ &= (2\pi)^{-1/2} \exp(ikz) + \frac{1}{E_k - H_0 \pm i\epsilon} V(r) \psi_k^{(\pm)}(r). \end{aligned}$$

В этой формуле, вообще говоря, нельзя переставлять между собой H_0 и V . Так как H_0 в знаменателе — дифференциальный оператор, последнее равенство в

действительности есть интегральное уравнение. Введем обозначения

$$\phi_k(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(ikz); \quad G_0(E_k \pm i\epsilon) \equiv \frac{1}{E_k - H_0 \pm i\epsilon} \quad (2.26)$$

и напомним

$$\psi_k^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \phi_k(\mathbf{r}) + G_0(E_k \pm i\epsilon) V(\mathbf{r}) \psi_k^{(\pm)}(\mathbf{r}). \quad (2.27)$$

Представленное в такой форме интегральное уравнение рассеяния называют уравнением *Липпмана—Швингера*.

Метод исследования задач рассеяния, основанный на уравнении в форме (2.27), разработан после второй мировой войны. Появление этого уравнения стимулировало резкий подъем теоретических исследований, одна из причин которого связана с возможностью применять уравнение (2.27) к более сложным, чем рассеяние на потенциале, случаям. В самом деле, если мишень состоит из большого числа частиц и имеет сложную структуру, то гамильтониан в формуле (2.26) не имеет простого вида (2.25). Тогда функцию Грина $G_0^{(\pm)}(\mathbf{r})$ нельзя представить в простой конкретной форме (2.19) и интегральное уравнение рассеяния, соответствующее уравнению (2.20), принимает крайне сложный вид. Поэтому математическое решение задачи затрудняется, а расчеты становятся весьма темными. Если же интегральное уравнение записано в виде (2.27), то нужно только заменить величину H_0 , входящую в G_0 , выражением, отвечающим указанной сложной системе частиц, и теоретический анализ становится очень прозрачным. Примеры этого нам встретятся ниже. Вторая причина быстрого подъема в области исследования задач рассеяния после появления уравнения Липпмана—Швингера состоит в том, что величину V в уравнении (2.27) можно считать не потенциалом, а взаимодействием более общего вида, например гамильтонианом взаимодействия поля с полем. Таким образом, область применимости уравнения рассеяния в форме (2.27) шире, чем уравнения (2.20): например, оно применимо в квантовой теории поля. О расширении области применимости этого

уравнения будет дополнительно сказано в гл. 4. Там уравнение вида (2.27) мы выведем путем рассмотрения переходов между квантовыми состояниями. Метод переходов между квантовыми состояниями применим не только к случаю одной материальной точки, он совершенно так же может быть использован в более общей квантовой механике поля. Третья причина отмеченного подъема в области исследований по теории рассеяния после появления уравнения Липпмана — Швингера состоит в том, что оно позволяет написать формальное решение, ценность которого в теории необычайно велика. В заключение данного параграфа напишем такое формальное решение.

Рассмотрим два некоммутирующих оператора A и B , для которых существуют обратные операторы. Как нетрудно убедиться, приведя к общему знаменателю дроби в левой части, выполняется соотношение

$$\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{1}{A} (B - A) \frac{1}{B} = \frac{1}{B} (B - A) \frac{1}{A}. \quad (2.28)$$

Хотя формула эта очень проста, она является мощным орудием теоретических выводов. Полагаем в ней

$$A = E_k - H_0 \pm i\varepsilon, \quad B = E_k - H \pm i\varepsilon.$$

Так как $H - H_0 = V$, мы имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{E_k - H_0 \pm i\varepsilon} &= \frac{1}{E_k - H \pm i\varepsilon} - \\ &- \frac{1}{E_k - H \pm i\varepsilon} V \frac{1}{E_k - H_0 \pm i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Если ввести обозначение

$$G(E_k \pm i\varepsilon) \equiv \frac{1}{E_k - H \pm i\varepsilon}, \quad (2.30)$$

то равенство (2.29) примет вид

$$G_0(E_k \pm i\varepsilon) = G(E_k \pm i\varepsilon) - G(E_k \pm i\varepsilon) V G_0(E_k \pm i\varepsilon). \quad (2.31)$$

Положив в формуле (2.28) $A = E_k - H \pm i\varepsilon$ и $B = E_k - H_0 \pm i\varepsilon$, получим следующее интегральное уравнение для G (G_0 считаем известным):

$$G(E_k \pm i\varepsilon) = G_0(E_k \pm i\varepsilon) + G_0(E_k \pm i\varepsilon) V G(E_k \pm i\varepsilon). \quad (2.32)$$

Применяя (2.31) к (2.27), получаем

$$\begin{aligned}\psi_k^{(\pm)} &= \phi_k + G(E_k \pm i\varepsilon)[1 - VG_0(E_k \pm i\varepsilon)]V\psi_k^{(\pm)} = \\ &= \phi_k + G(E_k \pm i\varepsilon)V[\psi_k^{(\pm)} - G_0(E_k \pm i\varepsilon)V\psi_k^{(\pm)}] = \\ &= \phi_k + G(E_k \pm i\varepsilon)V\phi_k = \\ &= [1 + G(E_k \pm i\varepsilon)V]\phi_k.\end{aligned}\quad (2.33)$$

Два последних равенства в формуле (2.33) написаны с учетом соотношения (2.27). Подставив выражение (2.30), получим

$$\psi_k^{(\pm)} = \phi_k + \frac{1}{E_k - H \pm i\varepsilon} V\phi_k. \quad (2.34)$$

В формулах (2.33) и (2.34) волновая функция рассеяния $\psi_k^{(\pm)}$ выражена через волновую функцию ϕ_k падающей частицы. Это одна из форм решения интегрального уравнения (2.27). Но чтобы узнать, какое состояние получится в результате действия оператора $G(E_k \pm i\varepsilon)V$ на волновую функцию падающей частицы, необходимо заранее знать полную систему строгих решений для гамильтониана всей системы H . В этом смысле (2.34) всего лишь формальное решение. Тем не менее для современной теории рассеяния очень существенна возможность получить такое формальное решение.

§ 3. Амплитуда рассеяния и дифференциальное сечение

Асимптотика волновой функции на бесконечности дается формулой (2.5). Пользуясь ею, выведем соотношение между амплитудой рассеяния и дифференциальным сечением.

Плотность j_z потока падающих частиц в положительном направлении оси z , т. е. число частиц N , падающих в секунду на единицу площади в этом направлении, дается волновой функцией падающей волны

$$\phi_k = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(ikz). \quad (3.1)$$

Поэтому

$$N = j_z = \frac{\hbar}{2mi} \left(\phi_k^* \frac{\partial \phi_k}{\partial z} - \phi_k \frac{\partial \phi_k^*}{\partial z} \right) = \frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m} = \frac{v}{(2\pi)^3}, \quad (3.2)$$

т. е. в 1 с на единицу площади падает $v/(2\pi)^3$ частиц. В формуле (3.2) звездочкой обозначены комплексно-сопряженные величины, $v = \hbar k/m$ — скорость падающих частиц относительно мишени.

Плотность потока частиц j_r , рассеиваемых в направлении вектора \mathbf{r} (в направлении угла рассеяния θ , который по предположению отличен от нуля), дается выражением

$$j_r = \frac{\hbar}{2mi} \left[\chi_r^* \frac{\partial \chi_r}{\partial r} - \chi_r \frac{\partial \chi_r^*}{\partial r} \right] \approx \frac{v}{(2\pi)^3 r^2} |f(\theta)|^2, \quad (3.3)$$

где χ_r — расходящаяся часть сферической волны, т. е.

$$\chi_r = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\exp(ikr)}{r} f(\theta).$$

В формуле (3.3) отброшены члены, убывающие на бесконечности быстрее, чем $1/r^2$.

Согласно формуле (3.3), число частиц, проходящих в 1 с по нормали через элемент поверхности dS в точке наблюдения, находящейся на большом расстоянии r от центра потенциала O , равно

$$\Delta N = j_r dS = \frac{v}{(2\pi)^3} |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Здесь $d\Omega$ — телесный угол, под которым элемент dS виден из точки O . Следовательно, дифференциальное сечение $\sigma(\theta)$ дается выражением

$$\sigma(\theta) d\Omega = \frac{\Delta N}{N} = |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (3.4)$$

Это соотношение между амплитудой рассеяния и дифференциальным сечением — наиболее важное и фундаментальное в теории рассеяния. Но амплитуда рассеяния $f(\theta)$ дается формулой (2.23). Следовательно, если бы удалось найти решение $\psi_k^+(\mathbf{r})$ интегрального уравнения (2.20), то, подставив его в формулу

(2.23) и выполнив интегрирование, можно было бы найти дифференциальное сечение по формуле (3.4).

Используя дираковские обозначения «бра» и «кет», формулу (2.23) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \int \phi_{k'}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = \\ &= -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \langle \phi_{k'} | V | \psi_k^{(+)} \rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Подставив сюда выражение для $\psi_k^{(+)}$ [формула (2.34)], получим для амплитуды рассеяния

$$f(\theta) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \langle \phi_{k'} | T(E_k + i\varepsilon) | \phi_k \rangle. \quad (3.6)$$

Здесь T — оператор, определенный соотношением

$$T(E_k + i\varepsilon) = V + V \frac{1}{E_k - H + i\varepsilon} V. \quad (3.7)$$

В дальнейшем он играет важную роль. Оператор $T(E_k + i\varepsilon)$ зависит, как от параметра, от собственного значения некоторой величины, называемой энергией падающей частицы. В связи с этим нужно помнить, что этот оператор не имеет смысла, если его рассматривать независимо от полной системы собственных состояний. Пользуясь формулой (3.6), представим дифференциальное сечение в виде

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \right) |\langle \phi_{k'} | T(E_k + i\varepsilon) | \phi_k \rangle|^2. \quad (3.8)$$

Плотности потока в падающей [формула (3.2)] и в расходящейся сферической [формула (3.3)] волне мы вычисляли отдельно. Но при рассмотрении свойств потока частиц всей системы в целом надо учитывать полную волновую функцию $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$ [формула (2.20)]. Тогда плотность потока запишется в виде

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi_k^{(+)*}(\mathbf{r}) \nabla \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) - \nabla \psi_k^{(+)*}(\mathbf{r}) \psi_k^{(+)}(\mathbf{r})]. \quad (3.9)$$

Взяв дивергенцию этого выражения и воспользовавшись уравнением Шредингера (2.4), получим

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi_k^{(+)*}(\mathbf{r}) \Delta \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) - \Delta \psi_k^{(+)*}(\mathbf{r}) \psi_k^{(+)}(\mathbf{r})] = 0. \quad (3.10)$$

Это обычный закон сохранения плотности потока частиц. Интегрируя (3.10) внутри сферы достаточно большого радиуса и переходя на основании теоремы Гаусса к поверхностному интегралу, получаем

$$\int_{r \rightarrow \infty} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} dS = 0. \quad (3.11)$$

Здесь \mathbf{n} — направленный наружу единичный вектор нормали к поверхности сферы. В качестве волновых функций ψ_k^{+} в выражение для вектора $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ в интеграле по поверхности сферы (3.11) подставим асимптотики при $r \rightarrow \infty$ [формула (2.5)]. Тогда, кроме определенной ранее плотности потока в плоской падающей волне j_z и в расходящейся сферической волне j_r , появятся еще интерференционные члены

$$j_{\text{инт}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \frac{1}{(2\pi)^3} \left[f^*(\theta) \frac{\exp(-ikr)}{r} \nabla \exp(ikz) - \nabla f^*(\theta) \frac{\exp(-ikr)}{r} \exp(ikz) + \exp(-ikz) \nabla f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} - \nabla \exp(-ikz) f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \right].$$

Взяв составляющую этого выражения вдоль вектора \mathbf{r} и заметив, что $kz = kr \cos \theta$, получим, если оставим лишь члены порядка r^{-1} , а члены более высокого порядка отбросим:

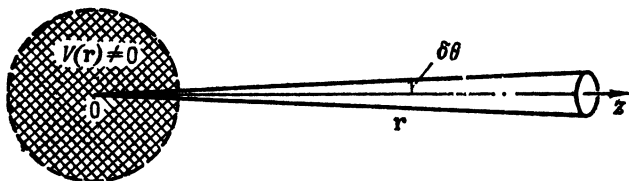
$$j_r^{\text{инт}}(\mathbf{r}) \approx \frac{\hbar k}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{(1 + \cos \theta)}{r} [f^*(\theta) \exp\{-ikr(1 - \cos \theta)\} + f(\theta) \exp\{ikr(1 - \cos \theta)\}].$$

Если расстояние r очень велико, то экспонента в правой части последнего равенства при $1 - \cos \theta \neq 0$ сильно осциллирует при незначительном изменении k и усреднение по узкому интервалу значений k дает

нуль. Эффективно это выражение отлично от нуля только при $\cos \theta = 1$. Поэтому можно написать

$$j_r^{\text{инт}} \approx \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{r} [f^*(0) \exp\{-ikr(1 - \cos \theta)\} + f(0) \exp\{ikr(1 - \cos \theta)\}]. \quad (3.12)$$

Таким образом, интерференционный член $j_r^{\text{инт}}$ дает плотность потока частиц, рассеиваемых в положительном направлении оси z , т. е. вперед. Поэтому для



Фиг. 14. Интенсивность потока при рассеянии вперед.

определения числа частиц, рассеиваемых в 1 с вперед, надо проинтегрировать выражение (3.12) по участку сферической поверхности, примыкающему к оси z , т. е. по области малых углов рассеяния $\delta\theta$ вблизи угла рассеяния $\theta = 0$ (фиг. 14). Тогда получим

$$\begin{aligned} 2\pi r^2 \int_0^{\delta\theta} d\theta \sin \theta j_r^{\text{инт}} &= \\ &= \frac{2\pi r}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k}{m} \left[f^*(0) \frac{1 - \exp\{-ikr(1 - \cos \delta\theta)\}}{ikr} + \right. \\ &+ \left. f(0) \frac{1 - \exp\{ikr(1 - \cos \delta\theta)\}}{-ikr} \right] = \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \frac{\hbar}{im} [f^*(0) - f(0)] = \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{\hbar}{m} \text{Im} f(0). \quad (3.13) \end{aligned}$$

При выводе второго из равенств (3.13) учтено, что вклад экспонент при $\delta\theta \neq 0$ равен нулю вследствие сильной осцилляции при небольших изменениях k .

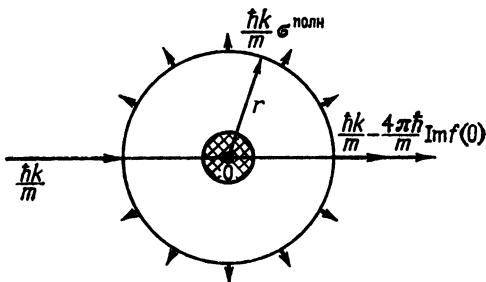
Подытожим сказанное. Согласно формуле (3.2), при $z \rightarrow -\infty$ интенсивность падающего потока, входящего внутрь сферы большого радиуса, равна

$$j_z = \frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m}, \quad (3.14)$$

а при $z \rightarrow +\infty$ интенсивность волнового потока, выходящего вперед при угле $\theta = 0$, получается сложением выражений (3.14) и (3.13) и равна

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \left[\frac{\hbar k}{m} - 4\pi \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} f(0) \right]. \quad (3.15)$$

В то же время полная интенсивность потока частиц,



Фиг. 15. Оптическая теорема.

рассеиваемых в направлениях $\theta \neq 0$, согласно формуле (3.4), равна

$$\frac{1}{(2\pi)^3} v \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k}{m} \sigma^{\text{полн}}. \quad (3.16)$$

Следовательно, в силу формулы (3.11), имеем

$$\frac{\hbar k}{m} = \left(\frac{\hbar k}{m} - 4\pi \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} f(0) \right) + \frac{\hbar k}{m} \sigma^{\text{полн}}, \quad (3.17)$$

откуда

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma^{\text{полн}}. \quad (3.18)$$

Полученное соотношение называют *оптической теоремой*. Мы вывели его из закона сохранения потока вероятности. Иллюстрация баланса потоков приведена на фиг. 15.

Оптическую теорему можно сформулировать в виде следующего представляющегося естественным утверждения: рассеяние в сторону происходит за счет выбывания частиц из падающего пучка.

§ 4. Борновское приближение

Задача о рассеянии частицы на потенциале $V(r)$ сводится к тому, чтобы сначала, решив интегральное уравнение рассеяния (2.20), найти волновую функцию $\psi_k^{(+)}$, затем, подставив $\psi_k^{(+)}$ в формулу (2.23), вычислить амплитуду рассеяния и, наконец, определить дифференциальное сечение, подставив амплитуду рассеяния в (3.4). Но точное решение интегрального уравнения (2.20) почти никогда невозможно. Поэтому рассмотрим приближенные методы его решения.

Наиболее простое приближение получится, если в точной формуле для амплитуды рассеяния

$$f(\theta) = -\frac{\sqrt{(2\pi)^3}}{4\pi} \int \exp(-ik' \cdot r') U(r') \psi_k^{(+)}(r') d^3r' \quad (4.1)$$

предположить, что в области с отличным от нуля потенциалом U [т. е. в области, по которой идет интегрирование в формуле (4.1)] расходящаяся сферическая волна пренебрежимо мала по сравнению с падающей плоской волной, и, отбросив сферическую волну, взять в качестве $\psi_k^{(+)}$ первое слагаемое правой части интегрального уравнения (2.20). Такое приближение называют *первым борновским приближением*. Тогда амплитуда рассеяния принимает вид

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int \exp(-ik' \cdot r') U(r') \exp(ikz') d^3r'. \quad (4.2)$$

Введем единичный вектор \mathbf{n} в направлении оси z и единичный вектор \mathbf{n}' в направлении рассеяния (фиг. 16):

$$kz' = k\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}', \quad k' \cdot \mathbf{r}' = k\mathbf{n}' \cdot \mathbf{r}'. \quad (4.3)$$

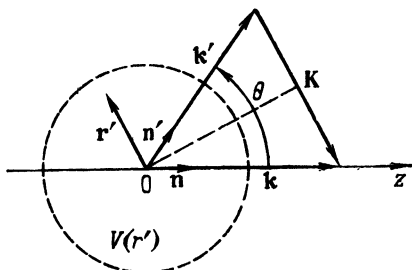
Абсолютная величина вектора изменения импульса $\hbar \mathbf{K} = \hbar \mathbf{k} - \hbar \mathbf{k}'$ будет такой (фиг. 16):

$$\hbar K = \hbar |\mathbf{K}| = 2\hbar k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (4.4)$$

С учетом соотношений (4.3) и (4.4) перепишем формулу (4.2) в виде

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}') U(r') d^3 r'. \quad (4.5)$$

При интегрировании по углам в формуле (4.5) воспользуемся сферической системой координат с осью z



Фиг. 16. Изменение направления импульса при рассеянии.

вдоль вектора \mathbf{K} так же, как делали при интегрировании в формуле (2.14). Получим

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r'^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \exp(iKr' \cos \theta') \times \\ \times U(r') = -\frac{1}{K} \int_0^\infty dr' r' \sin Kr' U(r'). \quad (4.6)$$

Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния дается выражением

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \frac{1}{K^2} \left[\int_0^\infty dr' r' \sin Kr' U(r') \right]^2. \quad (4.7)$$

Остается выполнить интегрирование по r' в формуле (4.6). Заметим, что, согласно формуле (4.7), диффе-

ренциальное сечение не зависит от знака потенциала. Полное сечение рассеяния получается интегрированием выражения (4.7) по полному телесному углу. Пользуясь соотношением

$$\sin \theta d\theta = \frac{1}{k^2} K dK,$$

вытекающим из равенства (4.4), легко свести расчет к интегрированию по K :

$$\sigma^{(1)}_{\text{полн}} = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \sigma(\theta) = \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{2k} \sigma(K) K dK. \quad (4.8)$$

А. Упругое рассеяние электронов на атомах

В качестве примера применим первое борновское приближение к расчету сечения упругого рассеяния электронов на атомах. Будем считать, что, поскольку масса атома велика по сравнению с массой электрона, можно пренебречь смещениями атомов. Пусть электрон с массой m и зарядом $-e$ рассеивается нейтральным атомом с номером Z . Примем, что облако внутренних электронов атома сферически-симметрично с центром в ядре и что плотность заряда в нем равна $-e\rho(r)$. При этом

$$\int d^3r \rho(r) = Z. \quad (4.9)$$

Потенциальная энергия статического электрического поля, действующего на падающий электрон, дается выражением

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \int \frac{e^2\rho(r'')}{|r-r''|} d^3r''. \quad (4.10)$$

Здесь первый член — потенциальная энергия взаимодействия падающего электрона с ядром, а второй — электростатическая потенциальная энергия взаимного отталкивания падающего электрона и электронного облака, окружающего ядро атома. Оба члена формулы (4.10) кулоновского типа, т. е. при больших r они обратно пропорциональны r . Но в выражении

(4.10) эти медленно убывающие члены взаимно уничтожаются, и в целом оно достаточно быстро убывает с расстоянием. Физически это обусловлено тем, что электронное облако экранирует заряд атомного ядра (вне электронного облака атом электрически нейтрален). Следовательно, к потенциалу (4.10) применима изложенная выше общая теория и можно пользоваться первым борновским приближением (4.7).

Подставив (4.10) в (4.5) и введя обозначение $U = 2mV/\hbar^2$, получим

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\theta) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}') \times \\ &\quad \times \left[-\frac{Ze^2}{r'} + e^2 \int \frac{\rho(r'')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} d^3r'' \right] = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{2me^2}{\hbar^2} [ZI_1 - I_2], \end{aligned} \quad (4.11)$$

где

$$I_1 = \int \frac{\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}')}{r'} d^3r', \quad (4.12)$$

$$I_2 = \iint \frac{\rho(r'') \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} d^3r' d^3r''. \quad (4.13)$$

Начнем с вычисления интеграла I_2 . Полагая

$$\Lambda(r) = \int \frac{\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r', \quad (4.14)$$

приводим его к виду

$$I_2 = \int \rho(r'') \Lambda(r'') d^3r''. \quad (4.15)$$

Величину $\Lambda(r)$ [формула (4.14)] можно истолковать как электростатический потенциал, создаваемый распределением электрического заряда с плотностью $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$. Следовательно, $\Lambda(r)$ — решение дифференциального уравнения

$$\Delta \Lambda(r) = -4\pi \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}). \quad (4.16)$$

Частное решение такого уравнения имеет вид

$$\Lambda(r) = 4\pi \frac{\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})}{K^2}. \quad (4.17)$$

Величина I_1 [формула (4.12)] не что иное, как $\Lambda(0)$. Поэтому с учетом выражения (4.17) имеем

$$I_1 = \Lambda(0) = \frac{4\pi}{K^2}. \quad (4.18)$$

Подставив (4.17) в (4.15), получим для I_2 выражение

$$I_2 = \int d^3r'' \frac{4\pi}{K^2} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'') \rho(r''). \quad (4.19)$$

Интегрируя по углам в формуле (4.19), так же как интегрировали в формуле (4.6), получаем

$$I_2 = \frac{(4\pi)^2}{K^3} \int_0^\infty r'' \rho(r'') \sin Kr'' dr''. \quad (4.20)$$

Подставляя (4.18) и (4.20) в (4.11), приходим к результату

$$f^{(1)}(\theta) = \frac{2me^2}{\hbar^2} \frac{[Z - A(\theta)]}{K^2}, \quad (4.21)$$

где

$$A(\theta) = 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin Kr}{Kr} \rho(r) r^2 dr \quad (4.22)$$

есть так называемый *атомный формфактор*. Поскольку в силу равенства (4.4)

$$K^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{4m^2 v^2}{\hbar^2} \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

выражение (4.21) принимает вид

$$f^{(1)}(\theta) = \frac{e^2}{2mv^2} [Z - A(\theta)] \frac{1}{\sin^2(\theta/2)}, \quad (4.23)$$

где v — скорость падающей частицы. Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния дается формулой

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(\frac{e^2}{2mv^2} \right)^2 [Z - A(\theta)]^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (4.24)$$

Пусть $A(\theta) = 0$. Тогда формула принимает вид

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (4.25)$$

согласующийся с формулой для дифференциального сечения резерфордского рассеяния, полученной в гл. 1 [формула (2.16)] из классической механики. Это выражение согласуется также со строгим результатом для рассеяния электронов кулоновскими силами, вывод которого в настоящей книге опущен. Но полагать $A(\theta) = 0$ в формуле (4.24) недопустимо по существу дела, так как тогда асимптотика потенциала при больших r приняла бы вид $V(r) \propto r^{-1}$ и изложенная выше общая теория оказалась бы неприменимой. Во втором борновском приближении, о котором говорится ниже, амплитуда кулоновского рассеяния расходится (бесконечно велика). Таким образом, отмеченное совпадение первого борновского приближения с точным результатом (4.25) носит случайный характер. Кстати, полное сечение, получаемое интегрированием (4.25) по всем телесным углам, расходится, тогда как полное сечение, получаемое на основании формулы (4.24), конечно.

Б. Границы применимости борновского приближения

Решив интегральное уравнение (2.20) методом последовательных приближений, получим

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = & \\ = (2\pi)^{-3/2} & \left[\exp(ikz) + \int G_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \exp(ikz') d^3\mathbf{r}' + \right. \\ & + \iint G_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G_0^{(+)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \times \\ & \left. \times \exp(ikz'') d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r}'' + \dots \right]. \quad (4.26) \end{aligned}$$

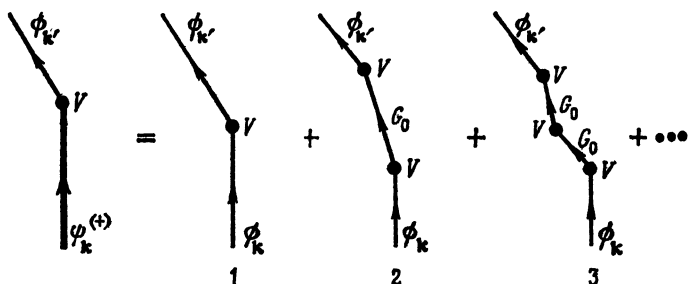
Аналогично, производя итерационное разложение уравнения Липпмана — Швингера (2.27), можно написать

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)} = & \phi_k + G_0(E_k + i\varepsilon) V \phi_k + \\ & + G_0(E_k + i\varepsilon) V G_0(E_k + i\varepsilon) V \phi_k + \dots \quad (4.27) \end{aligned}$$

Подставив (4.27) в (3.5), представим амплитуду рассеяния в виде

$$f(\theta) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) [\langle \phi_{k'} | V | \phi_k \rangle + \langle \phi_{k'} | VG_0(E_k + i\varepsilon) V | \phi_k \rangle + \langle \phi_{k'} | VG_0(E_k + i\varepsilon) VG_0(E_k + i\varepsilon) V | \phi_k \rangle + \dots]. \quad (4.28)$$

Это разложение по степеням потенциала V . Первое слагаемое в формуле (4.28) — первое борновское приближение. Второе слагаемое называют *вторым борновским приближением*. Величина $G_0(E_k + i\varepsilon)$ —



Фиг. 17. Диаграммы Фейнмана.

Цифрами 1, 2 и 3 обозначены 1-е, 2-е и 3-е борновские приближения.

функция Грина, отвечающая распространению расходящейся сферической волны. Ряд (4.28) можно представить в виде диаграмм, показанных на фиг. 17. Например, член второго борновского приближения на диаграмме можно представить так: падающая частица в состоянии ϕ_k , взаимодействуя с потенциалом V , изменяет направление своего движения [причем ее распространение описывается функцией $G_0(E_k + i\varepsilon)$], затем она вновь взаимодействует с V , опять изменяет направление и распространяется в конечном состоянии $\phi_{k'}$. Такие диаграммы, наглядно представляющие подобные процессы, называются *фейнмановскими*. Но даже вычисление второго борновского приближения в разложении (4.28) очень сложно. Кроме того, ряд (4.28) сходится только в очень ограниченном числе

случаев. Во многих случаях приближения более высоких порядков не улучшают результат первого приближения. Тем не менее ввиду его простоты первое борновское приближение применяют довольно часто. Начиная работать с какой-либо задачей, прежде всего вычисляют первое борновское приближение. И только если это не дает приемлемых результатов, начинают думать о других приближениях.

Поэтому мы остановимся на условиях сходимости разложения (4.28). Строгий математический анализ этого вопроса очень сложен. Мы дадим только достаточное условие сходимости ряда (4.28), вытекающее из физических соображений. Рассматривая ряд (4.26), можно видеть, что при больших r он, а следовательно, и ряд (4.28) сходятся при выполнении условия

$$\frac{1}{4\pi} \left| \int \frac{\exp(ikr')}{r'} U(r') \exp(ikz') d^3r' \right| \ll 1. \quad (4.29)$$

Пусть максимальное значение потенциала U есть U_0 , а радиус области, в которой потенциал отличен от нуля, равен a . Интегрирование по углам в формуле (4.29) дает

$$\frac{|U_0|}{4k^2} |\exp(2ika) - 2ika - 1| \ll 1. \quad (4.30)$$

В случае падающих частиц низкой энергии при малых ka экспоненту в формуле (4.30) можно разложить в степенной ряд по ka . Тогда условие (4.30) примет вид

$$\frac{1}{2} |U_0| a^2 \ll 1. \quad (4.31)$$

Таким образом, степенной ряд (4.28) сходится при рассеянии с малой энергией на потенциале, очень малом по величине. В противоположном случае рассеяния частиц высокой энергии произведение ka велико, экспонента в формуле (4.30) сильно осциллирует при небольших изменениях k и в среднем обращается в нуль. Тогда условие (4.30) принимает вид

$$\frac{|U_0| a}{2k} \ll 1. \quad (4.32)$$

С учетом соотношений $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$, $v = \hbar k/m$ последнюю формулу можно записать иначе:

$$\frac{|V_0|a}{\hbar v} \ll 1. \quad (4.33)$$

Полученное условие выполняется, если потенциал мал, а скорость частицы велика. Физический смысл его таков: частица рассеивается слабо, если время a/v , за которое она проходит область отличного от нуля потенциала, мало по сравнению с временем \hbar/V_0 , в течение которого потенциал может оказать на нее заметное влияние.

§ 5. Квазиклассическое приближение

Условие применимости борновского приближения (4.33) может нарушиться при большом $|V_0|$ и достаточно большой скорости частицы v . Поэтому в случае рассеяния с высокой энергией при достаточно сильном взаимодействии нужно рассмотреть другие приближения. В интегральном уравнении рассеяния

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(ikz) + \int G_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \quad (5.1)$$

величина $G_0^{(+)}$ определена интегралом

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p} \frac{\exp\{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\}}{k^2 - p^2 + i\varepsilon}. \quad (5.2)$$

Рассмотрим случай, когда почти все движущиеся с большой скоростью частицы не испытывают влияния потенциала («пролетают мимо»). Если ввести новую функцию φ :

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \varphi(\mathbf{r}) \exp(ikz), \quad (5.3)$$

то уравнение (5.1) можно переписать в виде интегрального уравнения для $\varphi(\mathbf{r})$

$$\varphi(\mathbf{r}) = 1 + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p} \frac{\exp\{i(\mathbf{p} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}''\}}{k^2 - p^2 + i\varepsilon} \times \\ \times U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') d^3\mathbf{r}'' \quad (5.4)$$

(здесь принято $\mathbf{r} - \mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}''$). Предположим, что $U\varphi$ в правой части — медленно меняющаяся функция. Тогда при $ka \gg 1$ экспонента в формуле (5.4) сильно осциллирует при интегрировании по \mathbf{r}'' и дает вклад в интеграл только, если векторы \mathbf{k} и \mathbf{p} почти равны по величине и параллельны. Поэтому положим

$$\mathbf{p} = \mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa},$$

а в знаменателе напишем приближенно

$$p^2 \approx k^2 + 2(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa}).$$

Тогда (5.4) примет вид

$$\varphi(\mathbf{r}) = 1 + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\boldsymbol{\kappa} \frac{\exp[i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}'']}{-2(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa}) + i\varepsilon} \times \\ \times U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') d^3\mathbf{r}'' \quad (5.5)$$

Поскольку вектор \mathbf{k} параллелен оси z , его можно записать в виде $(0, 0, k)$. Выполним в формуле (5.5) интегрирование по $\boldsymbol{\kappa}$:

$$\int d^3\boldsymbol{\kappa} \frac{\exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}'')}{-2(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa}) + i\varepsilon} = \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa_x \exp(i\kappa_x x'') \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa_y \exp(i\kappa_y y'') \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa_z \frac{\exp(i\kappa_z z'')}{-2(k\kappa_z) + i\varepsilon} = \\ = (2\pi)^2 \delta(x'') \delta(y'') \frac{-1}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa_z \frac{\exp(i\kappa_z z'')}{\kappa_z - i\varepsilon'}. \quad (5.6)$$

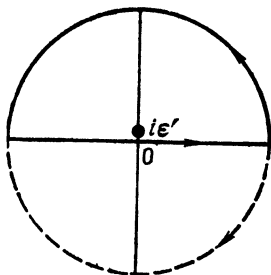
Правило обхода полюса в оставшемся интеграле уже определено условием $\varepsilon' = \varepsilon/2k$. Поэтому при $z'' > 0$ замкнем путь интегрирования в верхней полуплоскости, как показано на фиг. 18. Определяя вычет, получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\kappa_z \frac{\exp(i\kappa_z z'')}{\kappa_z - i\varepsilon'} = 2\pi i, \quad z'' > 0. \quad (5.7)$$

При $z'' < 0$ путь интегрирования нужно замкнуть в нижней полуплоскости. Но там нет полюсов, а поэтому

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\kappa_z \frac{\exp(i\kappa_z z'')}{\kappa_z - i\epsilon'} = 0, \quad z'' < 0. \quad (5.8)$$

Следовательно, в данном случае мы имеем только



Фиг. 18. Пути интегрирования (в плоскости комплексного переменного κ_z в формулах (5.7) и (5.8)).

рассеяние при $z'' > 0$, т. е. рассеяние вперед. Введем ступенчатую функцию

$$\theta(z) = \begin{cases} 1 & \text{при } z > 0, \\ 0 & \text{при } z < 0 \end{cases} \quad (5.9)$$

и перепишем выражение (5.6) в виде

$$\int d^3\kappa \frac{\exp(i\kappa \cdot r'')}{-2(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa}) + i\epsilon} = \frac{-i}{2k} (2\pi)^3 \delta(x'') \delta(y'') \theta(z''). \quad (5.10)$$

Подставив его в формулу (5.5) и проинтегрировав результат по x'' , y'' , придем к уравнению для φ

$$\varphi(\mathbf{r}) = 1 - \frac{i}{2k} \int_0^{\infty} dz'' U(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z - z'') \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z - z'')$$

или, после замены $z' = z - z''$, к уравнению

$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) = 1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^z dz' U(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z') \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z'). \quad (5.11)$$

Решение этого интегрального уравнения таково:

$$\varphi(x, y, z) = \exp \left\{ -\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^z U(x, y, z') dz' \right\}. \quad (5.12)$$

Подставив его в формулу (5.3), с учетом выражения $U = 2mV/\hbar^2$ получим

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp \left[ikz - i \frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^z V(x, y, z') dz' \right]. \quad (5.13)$$

Ниже будет показано, что условие применимости борновского приближения $|V_0|a/\hbar v \ll 1$ соответствует требованию малости второго члена показателя экспоненты в формуле (5.13), т. е. требованию, чтобы экспоненту можно было разлагать в ряд. В квазиклассическом же приближении второй член показателя должен быть мал не абсолютно, а по сравнению с первым членом показателя. Значит, условие существования приближения (5.13) имеет вид

$$\frac{|V_0|}{\hbar v} \ll k. \quad (5.14)$$

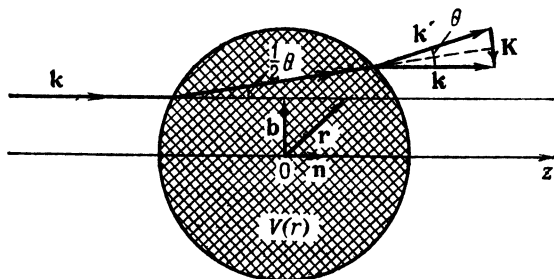
Если, кроме того, предположить, что

$$ka \gg 1, \quad (5.15)$$

то оказывается, что на параметр $|V_0|a/\hbar v$ не наложено никаких ограничений, т. е. при рассеянии с высокой энергией формулу (5.13) можно применять также и в случае сильного взаимодействия $|V_0|$. В этом смысле область применимости приближения (5.13) шире, чем борновского. Его называют *приближением эйконала*. Корень этого слова «эйкон» соответствует греческому слову *εἰκων*, которое означает «изображение»¹⁾. Приближение эйконала соответствует приближению геометрической оптики. Решение (5.13) не удовлетворяет асимптотическому условию (2.5). Тем не менее его можно подставить в интеграл (4.1) для амплитуды рассеяния, так как от подынтег-

¹⁾ Ср. русское «икона». — Прим. ред.

ральной функции (4.1) требуется, чтобы она верно передавала поведение истинной волновой функции при малых r , когда потенциал отличен от нуля, а ее свойства при больших r несущественны. Поэтому асимптотическое условие (2.5) можно не принимать во внимание.



Фиг. 19. Приближение эйконала.

Подставляя (5.13) в (4.1), получаем

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r} \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}\} U(r) \times \\ \times \exp\left\{-\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^z U(x, y, z') dz'\right\}. \quad (5.16)$$

На основании схемы, представленной на фиг. 19, можно написать

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} + z\mathbf{n}, \quad (5.17)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор в направлении оси z , а \mathbf{b} — составляющая вектора \mathbf{r} в направлении, перпендикулярном оси z (величина, соответствующая прицельному расстоянию классической механики). Как видно из схемы, в рассматриваемом приближении волновой вектор рассеянной волны \mathbf{k}' почти параллелен вектору \mathbf{n} , а вектор $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ почти перпендикулярен вектору \mathbf{n} . Поэтому приближенно имеем

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{b} + z\mathbf{K} \cdot \mathbf{n} \approx \mathbf{K} \cdot \mathbf{b}, \quad (5.18)$$

$$K = |\mathbf{K}| = 2k \sin(\theta/2). \quad (5.19)$$

Подставив (5.17) и (5.18) в (5.16), перепишем (5.16) в виде

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d^2\mathbf{b} \int_{-\infty}^{\infty} dz \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{b}) U(\mathbf{b} + z\mathbf{n}) \times \\ \times \exp\left\{-\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^z U(\mathbf{b} + z'\mathbf{n}) dz'\right\}. \quad (5.20)$$

Интеграл по z в формуле (5.20) можно взять следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz U(\mathbf{b} + z\mathbf{n}) \exp\left\{-\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^z U(\mathbf{b} + z'\mathbf{n}) dz'\right\} = \\ = 2ki \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d}{dz} \left[\exp\left\{-\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^z U(\mathbf{b} + z'\mathbf{n}) dz'\right\} \right] = \\ = 2ki \exp\left\{-\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^z U(\mathbf{b} + z'\mathbf{n}) dz'\right\} \Big|_{z=-\infty}^{z=+\infty} = \\ = 2ki \left[\exp\left\{-\frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{b} + z'\mathbf{n}) dz'\right\} - 1 \right].$$

Отсюда

$$f(\theta) = \frac{k}{2\pi i} \int d^2\mathbf{b} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{b}) [\exp\{\chi(k, b)\} - 1], \quad (5.21)$$

где

$$\chi(k, b) = -\frac{1}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{b} + z'\mathbf{n}) dz'. \quad (5.22)$$

Разложив экспоненту в (5.21) в ряд по χ и ограничившись первым членом разложения, получим

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d^2\mathbf{b} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{b}) U(\mathbf{b} + z'\mathbf{n}).$$

Переходя от переменных (\mathbf{b}, z') к переменной r и учитывая соотношение $\mathbf{K} \cdot \mathbf{b} \approx \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}$, записываем последний результат в виде

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \cdot U(r),$$

соответствующем первому борновскому приближению.

Вектор \mathbf{b} перпендикулярен оси z , а вектор \mathbf{K} почти перпендикулярен ей. Следовательно, угол ϕ между этими векторами фактически есть угол поворота вокруг оси z , ввиду чего интеграл (5.21) можно представить в виде

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{k}{i} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty b db \int_0^{2\pi} d\phi \exp(ibK \cos \phi) [\exp\{i\chi(k, b)\} - 1] = \\ &= \frac{k}{i} \int_0^\infty b db J_0(bK) [\exp\{i\chi(k, b)\} - 1]. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Здесь $J_0(x)$ — функция Бесселя нулевого порядка:

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \exp\{ix \cos \phi\}.$$

Подытоживая, сформулируем следующее правило вычисления амплитуды рассеяния в приближении эйконала: интегрируя по z' , находим функцию χ [формула (5.22)], подставляем ее в (5.23) и интегрируем по прицельному расстоянию. Правда, во многих случаях интеграл в формуле (5.23) не берется в аналитическом виде, и тогда не остается ничего иного, как интегрировать численно.

А. Оптическая теорема

Докажем, что амплитуда рассеяния в приближении эйконала (5.21) удовлетворяет оптической теореме (3.18). Амплитуду рассеяния вперед получим, если в (5.21) положим $\mathbf{K} = 0$:

$$f(0) = \frac{k}{2\pi i} \int d^2\mathbf{b} [\exp\{i\chi(k, b)\} - 1].$$

Ее мнимая часть дается выражением

$$\text{Im } f(0) = \frac{k}{2\pi} \int d^2\mathbf{b} [1 - \text{Re exp } \{i\chi(k, b)\}]. \quad (5.24)$$

Рассматривая амплитуду рассеяния как функцию волнового вектора падающей \mathbf{k} и волнового вектора рассеянной волны \mathbf{k}' и записывая ее в виде $f(\theta) \equiv f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, получаем для полного сечения рассеяния σ_s выражение

$$\begin{aligned} \sigma_s &= \int |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 d\Omega_{\mathbf{k}'} = \\ &= \left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \int d^2\mathbf{b} \int d^2\mathbf{b}' \int d\Omega_{\mathbf{k}'} \exp\{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{b} - \mathbf{b}')\} \times \\ &\times [\exp\{i\chi(k, b)\} - 1][\exp\{-i\chi^*(k, b')\} - 1]. \quad (5.25) \end{aligned}$$

Функция $\chi(k, b)$, вообще говоря, комплексна, поскольку у потенциала U [формула (5.22)] имеется мнимая часть, учитывающая поглощение падающих частиц мишенью. Элемент угла $d\Omega_{\mathbf{k}'}$ в формуле (5.25) — малый телесный угол, окружающий волновой вектор рассеянной волны \mathbf{k}' , а так как в рассматриваемом случае почти вся рассеянная волна концентрируется в направлении вперед, интеграл по поверхности сферы, соответствующий этому телесному углу, можно заметить двумерным интегралом по плоскости, перпендикулярной оси z и касающейся указанной сферы, т. е. можно принять

$$d\Omega_{\mathbf{k}'} \approx \frac{d^2\mathbf{k}'}{k^2}.$$

Тогда в силу соотношения

$$\begin{aligned} \int \exp\{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{b} - \mathbf{b}')\} d^2\mathbf{k}' &= \\ &= \int \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{b} - \mathbf{b}')\} d^2\mathbf{k}' = (2\pi)^2 \delta^2(\mathbf{b} - \mathbf{b}'), \end{aligned}$$

интеграл (5.25) принимает вид

$$\sigma_s = \int d^2\mathbf{b} |\exp\{i\chi(k, b)\} - 1|^2. \quad (5.26)$$

Если в этой формуле χ — действительная величина, то

$$\sigma_s = 2 \int d^2\mathbf{b} [1 - \text{Re exp } \{i\chi(k, b)\}]. \quad (5.27)$$

Сравнивая этот результат с выражением (5.24), завершаем доказательство оптической теоремы:

$$\sigma_s = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (5.28)$$

Если же происходит поглощение падающих частиц мишенью, т. е. χ — комплексная величина, то, составляя разность выражений (5.24) и (5.26), приходим к соотношению

$$\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) - \sigma_s = \int d^2b (1 - |\exp\{i\chi(k, b)\}|^2). \quad (5.29)$$

В гл. 3 будет показано, что правая часть соотношения (5.29) есть сечение поглощения падающих частиц мишенью. Обозначив его символом σ_r , перепишем (5.29) в виде

$$\sigma_s + \sigma_r = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (5.30)$$

Это — обобщенная оптическая теорема.

Б. Рассеяние на непрозрачном шаре

Рассмотрим в приближении эйконала рассеяние частиц на так называемом абсолютно черном шаре, т. е. на шаре, поглощающем все падающие на него частицы. В этом случае потенциал — комплексное число: $U = U_0 + iU_1$. Если прицельное расстояние b больше радиуса шара a , то потенциал на частицу не действует, $U_0 = U_1 = 0$. Следовательно, в этом случае $\exp[i\chi(k, b)] = 1$. Если же прицельное расстояние b меньше радиуса шара a , то все частицы поглощаются, а поэтому можно принять $U_1 = \infty$. В этом случае $\exp[i\chi(k, b)] = 0$ и выражение (5.23) принимает вид

$$f(\theta) = -\frac{k}{i} \int_0^a b J_0(Kb) db = ika^2 \frac{J_1(Ka)}{Ka}, \quad (5.31)$$

а сечение рассеяния σ_s — вид

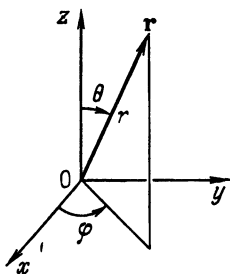
$$\sigma_s = |f(\theta)|^2 = (ka^2)^2 \left[\frac{J_1(2ka \sin(\theta/2))}{2ka \sin(\theta/2)} \right]^2. \quad (5.32)$$

Это точно соответствует картине дифракции классических волн.

Разложение по парциальным волнам

§ 1. Уравнение Шредингера
в сферических координатах

В предыдущей главе мы рассмотрели задачу рассеяния, пользуясь декартовыми координатами (x, y, z) . Но в случае когда механическая система инвариантна относительно вращений вокруг некоторой точки (пример — движение частицы в центрально-симметричном поле) или оси, удобнее сферические координаты. Хорошей иллюстрацией может служить задача о соб-



Фиг. 20. Система сферических координат.

ственных значениях энергии атома водорода. В этой главе мы и рассмотрим задачу рассеяния, пользуясь сферическими координатами. Связь между декартовыми и сферическими координатами ясна из фиг. 20:

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\z &= r \cos \theta.\end{aligned}\tag{1.1}$$

Ниже нам встретятся различные специальные функции. Все необходимые сведения о свойствах этих функций собраны в приложении в конце книги.

Хорошо известно, что гамильтониан относительного движения двух частиц

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(r) \quad (1.2)$$

в сферических координатах (1.1) принимает вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + V(r). \quad (1.3)$$

Для компонент орбитального момента $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ в сферических координатах имеем

$$\begin{aligned} L_x &= y p_z - z p_y = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L_y &= z p_x - x p_z = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L_z &= x p_y - y p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Отсюда вытекает, что

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Сравнив это выражение с выражением (1.3), можно переписать гамильтониан в виде

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r). \quad (1.6)$$

Член $\mathbf{L}^2/2mr^2$ можно интерпретировать как потенциал центробежной силы. В самом деле, если частица вращается вокруг начала отсчета O с орбитальным моментом L , то ее угловая скорость $\omega = L/mr^2$, а центробежная сила $m\omega^2 r = L^2/mr^3$. Потенциал этой силы равен $L^2/2mr^2$. Очевидно, что $[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$. Следовательно, \mathbf{L}^2 и L_z можно одновременно привести к диагональному виду. Их собственные функции и собственные значения даются формулами

$$\begin{aligned} L^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \\ L_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \hbar m Y_{l,m}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (1.7)$$

где $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ — шаровые гармонические функции, а индексы l и m в правой части пробегает значения

$$\begin{aligned} l &= 0, 1, 2, \dots, \\ m &= -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Разложим решение $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$ уравнения Шредингера задачи рассеяния

$$H\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = E_k\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

в ряд по собственным функциям углового момента $Y_{l,m}$:

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm} R_l^{(+)}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (1.10)$$

Подставив этот ряд в формулу (1.9), придем к уравнениям для радиальных функций $R_l^{(+)}(r)$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l^{(+)}(r) + V(r) R_l^{(+)}(r) = \\ = E_k R_l^{(+)}(r). \end{aligned} \quad (1.11)$$

Введя новые неизвестные функции

$$u_l(r) = r R_l^{(+)}(r), \quad (1.12)$$

приведем уравнение (1.11) к виду

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(r) = 0, \quad (1.13)$$

где

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \quad V = \frac{\hbar^2}{2m} U. \quad (1.14)$$

Заметим, что уравнение (1.13) имеет вид одномерного уравнения Шредингера для частицы, движущейся в потенциале $U + l(l+1)/r^2$.

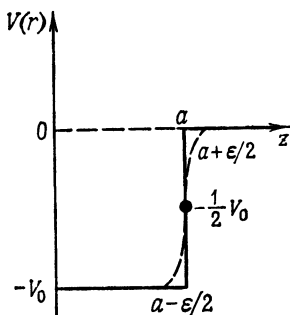
Рассмотрим теперь дополнительные условия, которым должны удовлетворять решения дифференциальных уравнений (1.11) и (1.13). Если при всех r потенциал $U(r)$ ограничен, то должно выполняться условие

$$u_l(0) = 0. \quad (1.15)$$

В самом деле, запишем уравнение Шредингера (1.9) в виде

$$\frac{\Delta\psi^{(+)}}{\psi^{(+)}} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(r) - E_k).$$

Правая часть здесь ограничена при всех значениях r . Если допустить, что в окрестности начала координат $\psi^{(+)}$ растет до бесконечности по закону $r^{-\alpha}$ ($\alpha > 0$),



Фиг. 21. Условие непрерывности.

то величина $\Delta\psi^{(+)}/\psi^{(+)}$ в левой части последнего равенства будет расходиться при $r \rightarrow 0$ как r^{-2} , что противоречит поведению правой части при $r \rightarrow 0$. Отсюда вытекает, что функция $\psi^{(+)}$ в начале координат должна быть ограниченной, т. е. ограниченными в начале координат должны быть также функции $R_l^{(+)}(r)$ в ряде (1.10). Следовательно,

$$u_l(0) = \lim_{r \rightarrow 0} r R_l^{(+)}(r) = 0,$$

что и утверждалось в равенстве (1.15).

Пусть в некоторой точке $r = a$ потенциал $U(r)$ имеет разрыв непрерывности. Рассмотрим условия, накладываемые уравнениями (1.13) на функции $u_l(r)$ и их производные в точке $r = a$. На фиг. 21 показан случай, когда потенциал $V(r)$ при $r = a$ имеет разрыв конечной величины. Запишем уравнение (1.13) в виде

$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} = \left[U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u_l(r). \quad (1.16)$$

Правая часть этого равенства при $r = a$ ограничена. Поэтому функция $u_l(r)$ при $r = a$ должна быть непрерывной. Если бы это было не так, например, если бы она имела в точке $r = a$ разрыв, то ее первая производная не существовала бы при $r = a$, а следовательно, не существовала бы и вторая производная, что противоречит правой части равенства (1.16). Далее, рассмотрим условие для первой производной du_l/dr в точке $r = a$. Представим потенциал, разрывный при $r = a$, как предел гладкого потенциала, показанного на фиг. 21 пунктиром, и проинтегрируем уравнение (1.16) по узкой области, в которой он отличается от разрывного потенциала. Получим

$$\begin{aligned} \frac{du_l}{dr} \left(a + \frac{\varepsilon}{2} \right) - \frac{du_l}{dr} \left(a - \frac{\varepsilon}{2} \right) &= \\ &= \int_{a-\varepsilon/2}^{a+\varepsilon/2} \left[U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u_l(r) dr. \end{aligned}$$

Так как в правой части подынтегральная функция ограничена и непрерывна в области интегрирования, можно написать

$$\text{Правая часть} = - \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{a^2} - U(a) \right] u_l(a) \varepsilon.$$

При $\varepsilon \rightarrow 0$ получаем 0, откуда вытекает, что первая производная функции $u_l(r)$ при $r = a$ непрерывна. Итак, мы получили, что в точке разрыва потенциала решение $u_l(r)$ должно быть непрерывным и гладким:

$$u_l^{\text{внутр}}(a) = u_l^{\text{внешн}}(a), \quad \frac{du_l^{\text{внутр}}}{dr}(a) = \frac{du_l^{\text{внешн}}}{dr}(a). \quad (1.17)$$

Здесь $u_l^{\text{внутр}}(r)$ — решение при $r < a$, а $u_l^{\text{внешн}}(r)$ — решение при $r > a$. Из равенства (1.12) вытекает, что таким же условиям должны удовлетворять и радиальные функции:

$$\begin{aligned} R_l^{(+)\text{внутр}}(a) &= R_l^{(+)\text{внешн}}(a), \\ \frac{dR_l^{(+)\text{внутр}}}{dr}(a) &= \frac{dR_l^{(+)\text{внешн}}}{dr}(a). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Возвратимся к уравнению (1.11). В области достаточно больших r , где потенциал $V(r)$ равен нулю, оно принимает вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l^{(+)}(r) = 0. \quad (1.19)$$

Общее решение этого дифференциального уравнения 2-го порядка равно линейной комбинации двух его независимых решений — шаровой функции Бесселя $j_l(kr)$ и шаровой функции Неймана $n_l(kr)$:

$$R_l^{(+)}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr). \quad (1.20)$$

Если воспользоваться шаровыми функциями Ханкеля $h_l^{(1)}$ и $h_l^{(2)}$

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(kr) &= j_l(kr) + in_l(kr), \\ h_l^{(2)}(kr) &= j_l(kr) - in_l(kr), \end{aligned} \quad (1.21)$$

то общее решение можно записать также в другом виде:

$$R_l^{(+)}(r) = A'_l h_l^{(1)}(kr) + B'_l h_l^{(2)}(kr). \quad (1.22)$$

В формулах (1.20) и (1.22) величины A_l , B_l , A'_l и B'_l — постоянные интегрирования, определяемые асимптотикой волновой функции $\psi_k^{(+)}(r)$ [гл. 2, формула (2.5)] и условиями непрерывности (1.18). Этими постоянными мы займемся в следующем параграфе.

§ 2. Разложение асимптотики волновой функции по парциальным волнам

В предыдущем параграфе, пользуясь разложением в ряд (1.10) по собственным функциям углового момента, мы свели задачу построения волновой функции $\psi_k^{(+)}$ к определению радиальных волновых функций $R^{(+)}$ и коэффициентов разложения C_{lm} . Такой метод получения решения называют *анализом парциальных волн*.

Рассмотрим общие свойства задачи рассеяния, разлагая по парциальным волнам асимптотику волновой функции при $r \rightarrow \infty$:

$$\psi_k^{(+)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \left[\exp(ikz) + \frac{f(\theta)}{r} \exp(ikr) \right]. \quad (2.1)$$

Разложение плоской волны в (2.1) дается формулой Рэлея

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta). \quad (2.2)$$

Множитель $(2l+1)$ возник за счет суммирования по квантовым числам m (полная волна не зависит от угла поворота φ вокруг оси z). Пользуясь асимптотикой функций $j_l(kr)$

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr}, \quad (2.3)$$

приведем формулу (2.2) к виду

$$\begin{aligned} \exp(ikz) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{(2l+1)}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos \theta) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} [\exp(ikr) - (-1)^l \exp(-ikr)] P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Далее, разлагая амплитуду рассеяния $f(\theta)$ по полной системе функций $P_l(\cos \theta)$, напомним

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ik} [\eta_l(k) - 1] P_l(\cos \theta). \quad (2.5)$$

Вообще говоря, $f(\theta)$ — неизвестная величина. Данное обстоятельство отражается в наличии неизвестных постоянных η_l в выражении (2.5). Подставляя (2.4) и (2.5) в (2.1), приходим к разложению асимптотики волновой функции рассеяния $\psi_k^{(+)}$ по парциальным волнам:

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} [\eta_l(k) \exp(ikr) - \\ &- (-1)^l \exp(-ikr)] P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (2.6)$$

В той области пространства, где потенциал $V(r)$ равен нулю, нам известно точное решение дифференциального уравнения (1.11) — оно дается формулами (1.20) и (1.22). Поэтому, подставляя (1.22) в разложение (1.10), учитывая, что волновая функция $\psi_k^{(+)}$ не зависит от угла φ в силу сферической симметрии потенциала $V(r)$, и переобозначая константы [обозначая константы, возникающие при суперпозиции C_{lm} с коэффициентами A'_l, B'_l в формуле (1.22), вновь символами A'_l, B'_l], запишем следующее разложение точной волновой функции вне области действия потенциала в ряд по парциальным волнам:

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_{l=0}^{\infty} [A'_l h_l^{(1)}(kr) + B'_l h_l^{(2)}(kr)] P_l(\cos \theta). \quad (2.7)$$

Неизвестные коэффициенты A'_l и B'_l определим, сравнивая асимптотику (2.7) с асимптотикой (2.6).

Асимптотики функций Ханкеля $h_l^{(1)}$ и $h_l^{(2)}$ имеют вид

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} (-i)^{l+1} \frac{\exp(ikr)}{kr}, \\ h_l^{(2)}(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} (i)^{l+1} \frac{\exp(-ikr)}{kr}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Подставив их в (2.7), определим асимптотику функций $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_{l=0}^{\infty} \left[(-i)^{l+1} A'_l \frac{\exp(ikr)}{kr} + \right. \\ &\quad \left. + (i)^{l+1} B'_l \frac{\exp(-ikr)}{kr} \right], \end{aligned} \quad (2.9)$$

сравнивая которую с (2.6), находим

$$A'_l = \frac{2l+1}{2i} (i)^{l+1} \eta_l(k), \quad B'_l = \frac{2l+1}{2i} (i)^{l+1}.$$

С учетом этих выражений в (2.7) получаем из формулы точное решение вне области действия потенциала, удовлетворяющее асимптотическому условию (2.6):

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2} [\eta_l(k) h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)] P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Разумеется, коэффициенты η_l в выражении (2.10) пока не определены. К их определению и сводится задача рассеяния. Разъясним это утверждение подробнее.

Прежде всего, подставив разложение (2.5) амплитуды рассеяния $f(\theta)$ по парциальным волнам в формулу (3.4) гл. 2, найдем следующее выражение для дифференциального сечения рассеяния:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} (\eta_l - 1) P_l(\cos \theta) \right|^2. \quad (2.11)$$

Полное сечение рассеяния получим интегрированием (2.11) по телесному углу:

$$\sigma_{\text{полн}} = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - \eta_l|^2. \quad (2.12)$$

При интегрировании надо воспользоваться условием ортогональности полиномов Лежандра

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'}.$$

Таким образом, сечение рассеяния можно получить, определив η_l .

Возвратимся к асимптотике (2.6) волновой функции $\psi_k^{(+)}$. Первый член в скобках правой части (2.6) выражает расходящуюся, а второй — сходящуюся сферическую волну. Рассмотрим сферу достаточно большого радиуса. Если внутри ее нет накопления

частиц (все входящие частицы выходят), то по закону сохранения потока вероятности абсолютные значения амплитуд двух указанных сферических волн должны равняться друг другу, т. е. должно выполняться условие

$$|\eta_l| = 1. \quad (2.13)$$

Тогда, согласно выражению (2.5),

$$\begin{aligned} f(0) - f^*(0) &= 2i \operatorname{Im} f(0) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ik} (\eta_l + \eta_l^* - 2) = \\ &= - \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ik} |\eta_l - 1|^2. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Сравнивая это с (2.12), получаем

$$\sigma_{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (2.15)$$

Это оптическая теорема, о которой мы уже говорили в гл. 2 [формула (3.18)].

Введем безразмерные действительные величины δ_l и представим условие (2.13) в виде

$$\eta_l = \exp(2i\delta_l). \quad (2.16)$$

Величины δ_l называют *фазами*¹⁾ рассеяния или *фазовыми сдвигами*. Смысл термина «фазовый сдвиг» будет разъяснен несколько ниже. Пользуясь фазами, можно написать

$$\eta_l - 1 = 2i \exp(i\delta_l) \cdot \sin \delta_l, \quad |1 - \eta_l|^2 = 4 \sin^2 \delta_l.$$

Тогда амплитуду рассеяния (2.5), дифференциальное сечение (2.11) и полное сечение (2.12) можно переписать

¹⁾ В оригинале — изменение фазы (английский термин phase shift — фазовый сдвиг), но, как принято в отечественной литературе, мы будем говорить просто о фазе. — *Прим. перев.*

сать в виде

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k} \exp(i\delta_l) \sin \delta_l P_l(\cos \theta),$$

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_l) \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2, \quad (2.17)$$

$$\sigma^{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l.$$

Пользуясь разложением полного сечения

$$\sigma^{\text{полн}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l^{\text{полн}}, \quad \sigma_l^{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (2.18)$$

можно дать максимальную оценку сечения рассеяния $\sigma_l^{\text{полн}}$ для отдельных парциальных волн

$$\sigma_l^{\text{макс}} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1). \quad (2.19)$$

При этом

$$\sigma_l = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.20)$$

Когда фазы принимают значения (2.20), говорят о *резонансном рассеянии*. Если же $\delta_l = n\pi$, то $\sigma^{\text{полн}} = 0$ (рассеяние отсутствует). О физическом смысле этого явления будет оказано ниже.

§ 3. Разложение интегрального уравнения рассеяния в ряд по парциальным волнам

Пока мы определили разложение по парциальным волнам асимптотики волновой функции $\psi_k^{(+)}$ (2.6), а также разложение (2.10) точной волновой функции вне области действия потенциала и показали, что задача рассеяния сводится к определению фаз δ_l . Обычно фазы определяют гладким сшиванием, пользуясь условием непрерывности (1.18) волновой функции

(2.10) вне области действия потенциала и волновой функции в области, где потенциал отличен от нуля. Этот метод определения фаз мы рассмотрим в следующем параграфе, а сейчас займемся определением фаз с помощью интегрального уравнения рассеяния (2.20), полученного в предыдущей главе. Так как это уравнение содержит всю информацию о рассеянии, то из него, в частности, можно определить и фазы. Чтобы сделать это, разложим интегральное уравнение рассеяния в ряд по парциальным волнам.

Выпишем еще раз интегральное уравнение рассеяния (2.20) гл. 2:

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(ikz) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi_k^{(+)}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (3.1)$$

Разложим в ряд волновую функцию $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$:

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l C_l R_l^{(+)}(r) P_l(\cos\theta). \quad (3.2)$$

Здесь C_l — неопределенные коэффициенты, а $R_l^{(+)}(r)$ — решение уравнения (1.11). Определим интегральное уравнение, которому должна удовлетворять эта функция.

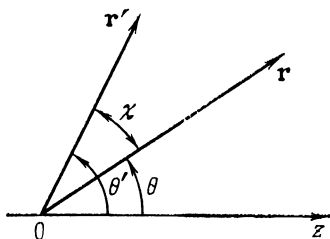
Разложим в ряд по парциальным волнам функцию Грина из правой части интегрального уравнения (3.1):

$$\frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = ik \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}) P_l(\cos\chi). \quad (3.3)$$

В этой формуле $r_{<}$ — меньшее, а $r_{>}$ — большее из значений r, r' , а χ — угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}' (фиг. 22). Имеет место соотношение

$$P_l(\cos\chi) = P_l(\cos\theta) P_l(\cos\theta') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos\theta) P_l^m(\cos\theta') \cos m(\varphi - \varphi'). \quad (3.4)$$

Подставим в интегральное уравнение (3.1) формулу Рэлея (2.2), разложение (3.2) волновой функции $\psi_k^{(+)}$ и разложение (3.3). Замечая, что интегрирование по φ' второго члена правой части (3.4) дает нуль, при-



Фиг. 22. Разложение функции Грина по парциальным волнам.

ходим к интегральному уравнению для радиальной функции:

$$C_l R_l^{(+)}(r) = \\ = j_l(kr) - ikC_l \int_0^{\infty} j_l(kr_{<}) h_l^{(1)}(kr_{>}) U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr'. \quad (3.5)$$

Чтобы найти входящие сюда неизвестные постоянные C_l , перепишем (3.5) с учетом определений (1.21):

$$C_l R_l^{(+)}(r) = j_l(kr) - \\ - ikC_l [j_l(kr) + in_l(kr)] \int_0^r j_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr' - \\ - ikC_l j_l(kr) \left[\int_0^{\infty} \{j_l(kr') + in_l(kr')\} U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr' \right] = \\ = j_l(kr) \left[1 - ikC_l \int_0^{\infty} j_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr' \right] + \\ + kC_l \int_0^{\infty} j_l(kr_{<}) n_l(kr_{>}) U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr'. \quad (3.6)$$

Полагая

$$C_l = 1 - ikC_l \int_0^{\infty} j_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr', \quad (3.7)$$

получаем, что $R_l^{(+)}(r)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$R_l^{(+)}(r) = j_l(kr) + k \int_0^{\infty} j_l(kr_{<}) n_l(kr_{>}) U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr'. \quad (3.8)$$

Решая (3.7), находим C_l :

$$C_l = \frac{1}{1 + ik \int_0^{\infty} j_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr'}. \quad (3.9)$$

Чтобы выяснить физический смысл найденных таким образом постоянных C_l , рассмотрим уравнение для радиальной функции $R_l^{(+)}(r > a)$ вне области действия потенциала в случае, когда потенциал отличен от нуля только внутри сферы радиусом a . Уравнение (3.8) принимает тогда вид

$$\begin{aligned} R_l^{(+)}(r > a) &= j_l(kr) + kn_l(kr) \int_0^r j_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr' + \\ &+ kj_l(kr) \int_r^{\infty} n_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr' = \\ &= j_l(kr) + kn_l(kr) \int_0^{\infty} j_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr'. \end{aligned} \quad (3.10)$$

При выводе (3.10) нужно воспользоваться тем, что интеграл от r до ∞ равен нулю, так как $U(r) = 0$ при $r > a$; по той же причине интеграл от 0 до r можно распространить от 0 до ∞ . Если принять, что

$$\operatorname{tg} \delta_l = -k \int_0^{\infty} j_l(kr') U(r') R_l^{(+)}(r') r'^2 dr', \quad (3.11)$$

то (3.10) можно переписать в виде

$$R_l^{(+)}(r > a) = j_l(kr) - \operatorname{tg} \delta_l n_l(kr). \quad (3.12)$$

Тогда для постоянных C_l получаем, согласно (3.9) и (3.11),

$$C_l = \frac{1}{1 - i \operatorname{tg} \delta_l} = \exp(i\delta_l) \cos \delta_l. \quad (3.13)$$

Подставляя (3.12) и (3.13) в разложение (3.2) и учитывая определения (1.21), приходим к выражению для волновой функции $\psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$ вне области действия потенциала:

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} i^l [\exp(2i\delta_l) h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)] P_l(\cos \theta), \quad r > a, \quad (3.14)$$

сравнивая которое с (2.10) и (2.16), убеждаемся, что величины δ_l , даваемые формулой (3.11), не что иное, как введенные ранее [формула (2.16)] фазы рассеяния. Таким образом, для решения задачи рассеяния нужно решить интегральное уравнение (3.8) для $R_l^{(+)}(r)$ и, подставив полученные радиальные функции в формулу (3.11), определить фазы δ_l .

Объясним, наконец, почему величины δ_l называют иногда фазовыми сдвигами. Подставляя асимптотику (2.8) в (3.14), получим асимптотику функции

$$\psi_k^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} \exp(i\delta_l) i^l \times \\ \times \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) P_l(\cos \theta). \quad (3.15)$$

Асимптотика же падающей плоской волны имеет вид

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(ikz) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} i^l \times \\ \times \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos \theta). \quad (3.16)$$

Сравнивая эти два выражения, видим, что состояние рассеяния отличается от плоской волны только сдвигом фазы. Именно поэтому они получили такое название.

А. Борновское приближение для парциальных волн

Так как получить точное решение интегрального уравнения (3.8) обычно бывает трудно, то необходимо рассмотреть приближенные способы его решения. Наиболее простой из них состоит в последовательном разложении (3.8) по степеням U и подстановке этого разложения в (3.11). Это — борновское приближение в применении к парциальным волнам. Первое борновское приближение получится, если $R_l^{(+)}(r)$ приближенно заменить первым членом выражения (3.8). Подставим его в (3.11). Тогда

$$\operatorname{tg} \delta_l^{(1)} = -k \int_0^{\infty} [j_l(kr)]^2 U(r') r'^2 dr'. \quad (3.17)$$

Если получаемые при этом фазы малы, то соответствующее приближение во многих случаях лучше обычного первого борновского приближения, рассмотренного нами в гл. 2, § 4.

Чтобы обосновать это утверждение конкретно, рассмотрим фазу S -волны ($l = 0$) при рассеянии на прямоугольной сферической потенциальной яме

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } r < a, \\ 0 & \text{при } r > a \end{cases} \quad (3.18)$$

($U_0 > 0$). Подставляя (3.18) в (3.17) и полагая $l = 0$, получаем

$$\operatorname{tg} \delta_0^{(1)} = kU_0 \int_0^a \left(\frac{\sin kr'}{kr'} \right)^2 r'^2 dr' = \frac{U_0}{2k^2} \left[ak - \frac{\sin(2ak)}{2} \right]. \quad (3.19)$$

Рассмотрим рассеяние с низкой энергией ($ak < 1$). Разложим выражение (3.19) в ряд по степеням ak и примем $\operatorname{tg} \delta_0^{(1)} \approx \delta_0^{(1)}$. Тогда получим

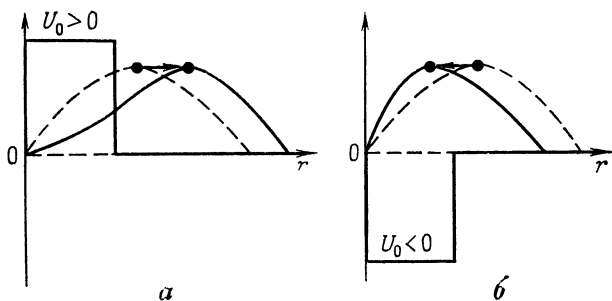
$$\delta_0^{(1)} \approx \frac{1}{3} U_0 a^2 (ak). \quad (3.20)$$

Этот результат согласуется со строгим решением, которое будет получено ниже, в § 6. Там показывается, что фаза S -волны при рассеянии на прямоугольной сферической потенциальной яме дается формулой

$$\delta_0 = -ka \left(1 - \frac{\operatorname{tg} a \sqrt{U_0}}{a \sqrt{U_0}} \right) \approx \frac{1}{3} U_0 a^2 (ak). \quad (3.21)$$

Б. Знаки фаз рассеяния

Из сравнения формул (3.15) и (3.16) ясно, что фазы рассеяния определены лишь с точностью до целого, кратного 2π . Для устранения этой неопределенности



Фиг. 23. Знаки фаз рассеяния.
а — отталкивание, $\delta_l < 0$; б — притяжение, $\delta_l > 0$.

воспользуемся соотношением (3.11). Примем, что фаза δ_l равна нулю, если равен нулю потенциал в выражении (3.11). Тем самым неопределенность фазы устраняется.

Посмотрим, какова связь между знаками фазы δ_l и потенциала. Воспользуемся тем, что при малом δ_l

выражение (3.11) можно заменить формулой борновского приближения (3.17). Тогда при положительном $U(r')$ (потенциал сил отталкивания) фаза δ_l отрицательна, а при отрицательном потенциале (потенциал сил притяжения) — положительна.

Сказанное можно наглядно пояснить следующим образом. На фиг. 23, а показано, что в случае отталкивательного взаимодействия волновая функция рассеяния смещается по сравнению с волновой функцией в отсутствие потенциала во внешнюю область (выталкивается из области действия потенциала). Волновая функция в отсутствие потенциала показана на фиг. 23, а пунктиром, а волновая функция рассеянной частицы — сплошной линией. Выталкивание соответствует тому, что вторая запаздывает по фазе относительно первой (величина δ_l отрицательна). В случае же сил притяжения (фиг. 23, б) волновая функция втягивается в область действия потенциала и опережает по фазе свободную волну (величина δ_l положительна).

§ 4. Определение фаз рассеяния из условия непрерывности волновой функции

Для определения фаз δ_l нужно решить интегральное уравнение (3.8) и подставить решение в формулу (3.11). Зная δ_l , по формулам (2.17) можно вычислить дифференциальное и полное сечения. Но найти точное решение интегрального уравнения (3.8) удастся только в простейших случаях, например в случае S-волны для сферической прямоугольной потенциальной ямы, а вообще точно решить его необычайно трудно, в частности потому, что ядро подынтегрального выражения (3.8) определено по-разному для случаев $r > r'$ и $r < r'$. Поэтому мы рассмотрим другой метод определения фаз. Вернемся к дифференциальному уравнению (1.11) и найдем фазы из условия непрерывности (1.18). На этом пути мы получим достаточно компактные выражения, которыми можно пользоваться для определения сечения рассеяния.

Пусть вне сферы радиусом a потенциал равен нулю. Решения для областей внутри и вне области действия потенциала обозначим символами $R_l^{(+)\text{внутр}}$ и $R_l^{(+)\text{внешн}}$ и потребуем, чтобы на сфере радиусом $r = a$ решение было непрерывным и гладким, как должно быть по условию (1.18). Это условие эквивалентно требованию непрерывности логарифмической производной волновой функции $R_l^{(+)}(r)$, т. е. равенству

$$\frac{dR_l^{(+)\text{внутр}}}{dr}(a)/R_l^{(+)\text{внутр}}(a) = \frac{dR_l^{(+)\text{внешн}}}{dr}(a)/R_l^{(+)\text{внешн}}(a). \quad (4.1)$$

В правой части этого равенства стоит точное решение вне области действия потенциала, определенное ранее формулой (2.10). Оно имеет вид

$$R_l^{(+)\text{внешн}}(r) \propto [\eta_l h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)]. \quad (4.2)$$

Решение в области ненулевого потенциала, вообще говоря, неизвестно, но если мы предположим, что оно существует, то в левой части (4.1) стоит некая определенная величина. Поэтому положим

$$f_l^{\text{внутр}} \equiv \frac{1}{k} \frac{dR_l^{(+)\text{внутр}}}{dr}(a)/R_l^{(+)\text{внутр}}(a). \quad (4.3)$$

Величина $f_l^{\text{внутр}}$ отражает свойства волновой функции в области ненулевого потенциала. Подставляя (4.2) и (4.3) в (4.1), получаем

$$f_l^{\text{внутр}} = \frac{\eta_l h_l^{(1)'}(ka) + h_l^{(2)'}(ka)}{\eta_l h_l^{(1)}(ka) + h_l^{(2)}(ka)}. \quad (4.4)$$

Здесь штрих, обозначающий дифференцирование, имеет следующий смысл:

$$h_l^{(1)'}(kr) \equiv \frac{dh_l^{(1)}(kr)}{d(kr)}. \quad (4.5)$$

Из (4.4) найдем η_l :

$$\eta_l(k) = - \frac{h_l^{(2)}(ka) f_l^{\text{внутр}} - h_l^{(2)'}(ka)}{h_l^{(1)}(ka) f_l^{\text{внутр}} - h_l^{(1)'}(ka)}. \quad (4.6)$$

Выражение (4.6) означает, что для определения η_l или, что эквивалентно, фаз δ_l достаточно знать волновую функцию и ее производную с внутренней стороны потенциальной стенки и не нужны сведения о волновой функции в глубине области ненулевого потенциала. Данное обстоятельство позволяет предложить плодотворный метод систематизации данных о рассеянии частиц на сложных системах, таких, как атомные ядра. Например, в случае рассеяния нейтронов на ядрах, ввиду сложности внутреннего строения ядра, точно определить волновую функцию нейтрона внутри ядра практически невозможно. Свойства ядра характеризуют специальными физическими величинами $f_l^{\text{внутр}}$, заданными на его поверхности (они входят в сечения как параметры). Величины $f_l^{\text{внутр}}$ определяют, подгоняя расчетные сечения под экспериментальные данные. Таким методом можно упорядочить данные о рассеянии нейтронов ядрами, не вдаваясь в сложную задачу о внутренней структуре атомного ядра. В то же время ясно, что величины $f_l^{\text{внутр}}$, найденные путем сравнения с экспериментом, дают важную информацию о строении ядра.

Из формулы (4.6) можно вывести выражения для фаз δ_l . Согласно (2.16),

$$\operatorname{tg} \delta_l = \frac{1}{i} \frac{\eta_l - \eta_l^*}{\eta_l + \eta_l^* + 2}. \quad (4.7)$$

Подставляя сюда (4.6), получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \delta_l &= i \frac{[h_l^{(1)}(ka) + h_l^{(2)}(ka)] f_l^{\text{внутр}} - [h_l^{(1)'}(ka) + h_l^{(2)'}(ka)]}{[h_l^{(1)}(ka) - h_l^{(2)}(ka)] f_l^{\text{внутр}} - [h_l^{(1)'}(ka) - h_l^{(2)'}(ka)]} = \\ &= \frac{j_l(ka) f_l^{\text{внутр}} - j_l'(ka)}{n_l(ka) f_l^{\text{внутр}} - n_l'(ka)}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Здесь $f_l^{\text{внутр}}$ — действительные величины. При написании последнего равенства в формуле (4.8) надо воспользоваться формулами (1.21).

Рассмотрим рассеяние на твердом шаре. В этом случае высота потенциала внутри сферы радиусом a

бесконечно велика. Волновая функция не может проникнуть внутрь шара, а поэтому на его поверхности $R_l^{(+)} \text{внутр}(a) = 0$. Это значит, что [формула (4.3)] $f_l^{\text{внутр}}$ — бесконечно большая величина. Обозначим в случае твердого шара η_l через $\eta_l^{(C)}$, а δ_l — через $\delta_l^{(C)}$. Тогда из (4.6) и (4.8) получим

$$\eta_l^{(C)} = -\frac{h_l^{(2)}(ka)}{h_l^{(1)}(ka)}, \quad \text{tg } \delta_l^{(C)} = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}. \quad (4.9)$$

Разумеется, в данном случае по-прежнему выполняется соотношение

$$\eta_l^{(C)} = \exp(2i\delta_l^{(C)}). \quad (4.10)$$

Выделяя в правой части формулы (4.6) члены, соответствующие рассеянию на твердом шаре, приводим (4.6) к виду

$$\eta_l(k) = \eta_l^{(C)} \frac{f_l^{\text{внутр}} - h_l^{(2)'}(ka)/h_l^{(2)}(ka)}{f_l^{\text{внутр}} - h_l^{(1)'}(ka)/h_l^{(1)}(ka)}. \quad (4.11)$$

Выделим в этом выражении действительные и мнимые части логарифмических производных:

$$\begin{aligned} \frac{h_l^{(1)'}(ka)}{h_l^{(1)}(ka)} &= r_l(ka) + is_l(ka), \\ \frac{h_l^{(2)'}(ka)}{h_l^{(2)}(ka)} &= r_l(ka) - is_l(ka). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Тогда формула (4.11) примет вид

$$\eta_l(k) = \eta_l^{(C)}(k) \frac{f_l^{\text{внутр}} - r_l(ka) + is_l(ka)}{f_l^{\text{внутр}} - r_l(ka) - is_l(ka)}. \quad (4.13)$$

Подставив это выражение в формулу (2.12), с учетом соотношения (4.10) легко получить для $\sigma^{\text{полн}}$ выражение

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{полн}} &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left| [1 - \exp(2i\delta_l^{(C)})] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{2is_l(ka)}{f_l^{\text{внутр}} - r_l(ka) - is_l(ka)} \right|^2. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Член в квадратных скобках в этом выражении соответствует рассеянию на твердом шаре. Другой член зависит от $f_l^{\text{внут}}$ и отражает свойства волновой функции в области ненулевого потенциала. При рассеянии частиц на атомных ядрах первый член учитывает рассеяние за счет отражения от поверхности ядра, когда частица не проникает внутрь ядра. В ядерной физике его называют *потенциальным рассеянием*. Второе слагаемое учитывает рассеяние с проникновением частицы внутрь ядра. Этот тип рассеяния называют *резонансным*. Таким образом, второе слагаемое отражает внутреннюю структуру ядра.

§ 5. Сечение реакций

Кроме рассмотренного выше упругого рассеяния, когда ядро рассеивает нейтроны без изменения своего внутреннего состояния, при рассеянии нейтронов на ядрах возможны и другие процессы. Нейтроны с высокой энергией испытывают неупругое рассеяние, при котором нейтрон рассеивается с потерей энергии, а ядро возбуждается. Ядро может поглотить нейтрон с низкой энергией и испустить другую частицу, например дейтрон. При таких процессах уменьшается число нейтронов с энергией, равной энергии падающего нейтрона. Процессы, связанные с какими-либо изменениями внутренней структуры ядра, называют *ядерными реакциями*. Полную вероятность всех таких процессов, или их полное сечение, называют *сечением реакций* и обозначают символом σ_r .

Когда идут ядерные реакции, амплитуда расходящейся волны должна быть меньше амплитуды сходящейся волны нейтрона. В этом случае условие (2.13) не имеет места, его нужно заменить условием

$$|\eta_l| < 1. \quad (5.1)$$

Чтобы найти сечение ядерных реакций σ_r , нужно рассмотреть сферу S достаточно большого радиуса r с центром в ядре, найти эффективную плотность по-

тока нейтронов $J^{(r)}$, проходящих внутрь сферы по нормали к ее поверхности и накапливающихся внутри ее, и разделить $J^{(r)}$ на плотность потока падающих нейтронов j_z . Так как радиус r достаточно велик, для волновой функции нейтронов можно взять асимптотическое выражение (2.6). При этом надо помнить, что имеет место не соотношение (2.13), а соотношение (5.1). Величина $J^{(r)}$ дается интегралом по поверхности сферы радиусом r от r -й составляющей плотности потока частиц j_r :

$$J^{(r)} = - \frac{\hbar}{2im} \int_S \left(\psi_k^{(+)*} \frac{\partial \psi_k^{(+)}}{\partial r} - \psi_k^{(+)} \frac{\partial \psi_k^{(+)*}}{\partial r} \right) r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad (5.2)$$

Минус перед интегралом означает, что поток направлен внутрь сферы. Подставляя асимптотику (2.6) в (5.2), удерживая члены с самой низкой степенью r^{-1} и интегрируя по углам с использованием ортогональности $P_l(\cos \theta)$, легко вывести следующее выражение:

$$J^{(r)} = \frac{\pi}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k}{2m} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k^2} [1 - |\eta_l|^2]. \quad (5.3)$$

Согласно формуле (3.2) из гл. 2,

$$j_z = \frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m}; \quad (5.4)$$

поэтому для сечения реакций получаем

$$\sigma_r = \frac{J^{(r)}}{j_z} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - |\eta_l|^2]. \quad (5.5)$$

Сечение же упругого рассеяния дается формулой (2.12):

$$\sigma_s = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - \eta_l|^2 \quad (5.6)$$

[при выводе формулы (2.12) условие $|\eta| = 1$ еще не использовалось]. Полное сечение $\sigma^{\text{полн}}$, включающее

в себя сечение упругого рассеяния и сечение реакций, равно сумме сечений (5.5) и (5.6):

$$\sigma^{\text{полн}} = \sigma_s + \sigma_r = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - \text{Re } \eta_l(k)]. \quad (5.7)$$

В какой форме нужно писать оптическую теорему, чтобы она охватывала общий случай, когда идут ядерные реакции? Этот вопрос мы уже рассматривали в гл. 2 [формула (5.30)], когда речь шла о приближении эйконала. Дадим здесь строгий, а не приближенный вывод. В силу формулы (2.5) имеем

$$f(0) - f^*(0) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} [\eta_l(k) + \eta_l^*(k) - 2],$$

откуда

$$\text{Im } f(0) = - \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2k} [\text{Re } \eta_l(k) - 1]. \quad (5.8)$$

Сравнивая (5.8) и (5.7), приходим к обобщенной оптической теореме:

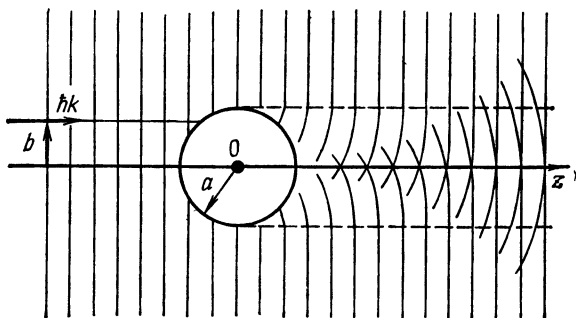
$$\sigma_s + \sigma_r = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0). \quad (5.9)$$

Из формулы (5.5) явствует, что при $|\eta_l| = 1$ выполняется равенство $\sigma_r = 0$, а σ_s совпадают с полным сечением упругого рассеяния (2.17). Это естественно. Далее, при $\eta_l = 0$ сечение реакций (5.5) принимает свое максимальное значение. При этом

$$\sigma_s = \sigma_r. \quad (5.10)$$

В общем случае при $|\eta_l| < 1$ ядерные реакции обязательно сопровождаются упругим рассеянием. Чтобы пояснить причину этого, рассмотрим гипотетический случай, когда все падающие частицы, сталкиваясь с ядром, принимают участие в ядерных реакциях, но не рассеиваются упруго. Энергия падающих частиц при этом должна быть велика. Следовательно, длина волны частицы $\lambda = 2\pi/k$ мала по сравнению с радиусом ядра a , и выполнено условие $ka \gg 1$, при котором за-

дачу можно рассматривать квазиклассически, вводя прицельное расстояние b (фиг. 24). Частица с прицельным расстоянием b и импульсом $\hbar k$ имеет относительно центра ядра O угловой момент, равный $\hbar kb$. Так как собственные значения этого момента равны $\hbar l$, величина b может принимать значения l/k . Из



Фиг. 24. Дифракционное рассеяние.

фиг. 24 ясно, что частица сталкивается с ядром, вызывая ядерные реакции, только при $b < a$. Если же $b > a$, то частица пролетает мимо и, не сталкиваясь с ядром, не может вызывать ядерных реакций. В то же время, по нашему предположению, в этом случае нет и упругого рассеяния. Таким образом, в силу соотношения $b = l/k$ возможны два варианта:

1) при $l < ak$ обязательно происходят ядерные реакции, т. е. $\eta_l = 0$ и $\sigma_s = \sigma_r$;

2) при $l > ak$ нет ни ядерных реакций, ни упругого рассеяния. Тогда $\eta_l = 1$, $\sigma_s = \sigma_r = 0$. Следовательно, в нашем случае формулы (5.6) и (5.5) дают

$$\sigma_s = \sigma_r = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ak} (2l + 1) = \frac{\pi}{k^2} (ak + 1)^2 \approx \pi a^2. \quad (5.11)$$

Мы учли здесь, что $1 \ll ka$. Итак, в нашем случае сечение упругого рассеяния и сечение реакций равны каждое πa^2 (геометрическому сечению ядра). Равен-

ство сечения ядерных реакций геометрическому сечению ядра легко объяснить с классической точки зрения¹⁾. Но с классической точки зрения не очень ясно, почему сечение упругого рассеяния тоже должно равняться геометрическому сечению ядра. Дело же в том, что волны падающих частиц дифрагируют, отклоняясь в область за ядром, как показано на фиг. 24. Отклоняющиеся в область за ядром волны можно представить в виде суперпозиции плоских волн в «тени» ядра и волн, расходящихся от центра ядра. Эти сферические волны наблюдаются как упругое рассеяние. Такое рассеяние называют *дифракционным*. Из-за наличия дифракционного рассеяния сечение упругого рассеяния не равно нулю даже в случае полного поглощения падающих частиц ядром.

§ 6. Приближенные методы, основанные на разложении по парциальным волнам

Борновское приближение (гл. 2, § 4) и приближение эйконала (гл. 2, § 5) относятся в основном к случаю высокой энергии падающей частицы. Типичное же приближение для случая низкой энергии падающей частицы основано на разложении по парциальным волнам. Пусть при квазиклассическом подходе импульс падающей частицы равен $\hbar k$, а ее прицельное расстояние b . Тогда угловой момент частицы относительно центра потенциала будет $\hbar k b = \hbar l$. Радиус действия потенциала обозначим через a . Для рассеяния необходимо, чтобы выполнялось условие $b \leq a$, т. е.

$$l \leq ak. \quad (6.1)$$

При малых ak (при низкой энергии) в рассеяние, согласно (6.1), будет давать вклад только малые собственные значения углового момента l . При больших ak верхний предел значений l , дающих вклад в рассеяние, велик. Даже при не очень большом возрастании

¹⁾ Все частицы, сталкивающиеся с ядром, выбывают из потока. — *Прим. перев.*

энергии падающей частицы этот верхний предел может стать равным 30—40. В такой ситуации разложение по парциальным волнам практически теряет смысл. При низких энергиях падающей частицы ($ak \leq 1$) главный вклад в рассеяние вносит S -волна ($l = 0$) с небольшой примесью P -волны ($l = 1$). В этом случае можно полностью пренебречь вкладом от волн с $l \geq 2$ и задача существенно упрощается.

А. Рассеяние на твердом шаре

Пользуясь известным нам точным решением задачи о рассеянии на твердом шаре, посмотрим, как уменьшается с ростом l вклад в рассеяние больших l при малом ka . Согласно (4.9), в данном случае фазы даются выражением

$$\operatorname{tg} \delta_l^{(C)} = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)}. \quad (6.2)$$

Учитывая, что при $ka \ll 1$

$$j_l(ka) \xrightarrow{ka \rightarrow 0} \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(ka) \xrightarrow{ka \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}}, \quad (6.3)$$

получаем для фаз при низкой энергии формулу

$$\operatorname{tg} \delta_l^{(C)} = -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}, \quad (6.4)$$

из которой видно, что фазы быстро уменьшаются с ростом l , в частности,

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \delta_0^{(C)} &= -ka, \\ \operatorname{tg} \delta_1^{(C)} &= -\frac{1}{3}(ka)^3, \\ \operatorname{tg} \delta_2^{(C)} &= -\frac{1}{45}(ka)^5. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Поскольку величина ka мала, можно, например, при $l = 0$ написать

$$\delta_0^{(C)} \approx -ka \quad (6.6)$$

и пренебречь остальными фазами. Тогда амплитуда рассеяния S -волны будет равна

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \exp(i\delta_0^{(C)}) \sin \delta_0^{(C)} \approx \frac{\delta_0^{(C)}}{k} = -a. \quad (6.7)$$

а дифференциальное и полное сечения выразятся формулами

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= |f(\theta)|^2 = a^2, \\ \sigma^{\text{полн}} &= 4\pi a^2. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Таким образом, сечение рассеяния для S -волны в 4 раза превышает геометрическое сечение твердого шара πa^2 . Связано это с тем, что парциальная волна с $l=0$ в разложении падающей плоской волны по формуле Рэлея концентрируется в направлении к центру потенциала и колебания в ней сферически-симметричны. Поэтому сечение рассеяния для S -волны пропорционально полной площади поверхности шара $4\pi a^2$, а не площади его поперечного сечения πa^2 .

Рассмотрим теперь случай очень больших ka . В силу асимптотических формул

$$\begin{aligned} j_l(ka) &\xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} \frac{\sin(ka - l\pi/2)}{ka}, \\ n_l(ka) &\xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} -\frac{\cos(ka - l\pi/2)}{ka} \end{aligned} \quad (6.9)$$

соотношение (6.2) принимает вид

$$\operatorname{tg} \delta_l^{(C)} = -\frac{\sin(ka - l\pi/2)}{\cos(ka - l\pi/2)} = \operatorname{tg}\left(-ka + \frac{1}{2}l\pi\right), \quad (6.10)$$

откуда для фаз получается явное выражение

$$\delta_l^{(C)} = -ka + \frac{1}{2}l\pi. \quad (6.11)$$

Полагая $ka = l_{\text{макс}}$, получаем для полного сечения

$$\sigma^{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{макс}}} (2l+1) \sin^2\left(ka - \frac{1}{2}l\pi\right).$$

Сумму в правой части можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned}\sigma^{\text{полн}} &= \frac{4\pi}{k^2} \left[\sin^2 ka + 3 \sin^2 \left(ka - \frac{\pi}{2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + 5 \sin^2 (ka - \pi) + \dots \right] = \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \left[\left\{ \sin^2 ka + \sin^2 \left(ka - \frac{\pi}{2} \right) \right\} + \right. \\ &\quad \left. + 2 \left\{ \sin^2 \left(ka - \frac{\pi}{2} \right) + \sin^2 (ka - \pi) \right\} + \right. \\ &\quad \left. + 3 \left\{ \sin^2 (ka - \pi) + \sin^2 \left(ka - \frac{3}{2} \pi \right) \right\} + \dots \right].\end{aligned}$$

Все выражения в фигурных скобках здесь равны 1, а поэтому

$$\sigma^{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{макс}}} l = \frac{2\pi}{k^2} \frac{(ka)(ka+1)}{2} \approx 2\pi a^2. \quad (6.12)$$

Итак, при большой энергии нужно суммировать вплоть до максимального l , а получаемое полное сечение оказывается вдвое больше геометрического. Множитель 2 здесь можно объяснить так: одно πa^2 учитывает рассеяние падающей волны на передней поверхности шара, а другое πa^2 — показанное на фиг. 24 дифракционное рассеяние в область тени.

Б. S-волна при рассеянии на прямоугольной сферической потенциальной яме

Ранее мы уже отмечали, что при рассеянии с низкой энергией ($ka \ll 1$) достаточно учесть S-волну ($l=0$). Рассмотрим подробнее случай S-волны при рассеянии на центрально-симметричной потенциальной яме ($V_0 > 0$)

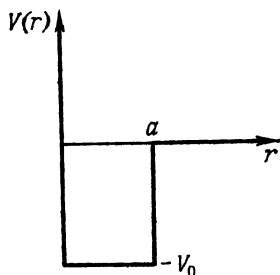
$$V(r) \begin{cases} -V_0, & \text{при } r < a, \\ 0 & \text{при } r > a, \end{cases} \quad (6.13)$$

показанной на фиг. 25.

В области ямы нужно решить дифференциальное уравнение

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + (k^2 + U_0) \right] u_0^{\text{внутр}}(r) = 0, \quad (6.14)$$

получаемое из (1.13) при $l = 0$. Здесь $U_0 = 2mV_0/\hbar^2$.



Фиг. 25. Прямоугольная потенциальная яма.

При $r = 0$ функция $u_0^{\text{внутр}}(r)$ должна удовлетворять условию (1.15):

$$u_0^{\text{внутр}}(0) = 0, \quad (6.15)$$

откуда следует, что решение (6.14) имеет вид

$$u_0^{\text{внутр}}(r) = A \sin \kappa r, \quad (6.16)$$

где

$$\kappa = \sqrt{k^2 + U_0}, \quad (6.17)$$

Для определения константы A решение (6.16) нужно сшить с решением вне ямы, пользуясь условием (1.17), но в данном случае нет необходимости определять эту константу. В самом деле, радиальная функция внутри ямы $R_0^{(+)\text{внутр}}(r)$ дается выражением

$$R_0^{(+)\text{внутр}}(r) = \frac{u_0^{\text{внутр}}(r)}{r} = A \frac{\sin \kappa r}{r}, \quad (6.18)$$

откуда следует, что величина $f_0^{\text{внутр}}$, определенная формулой (4.3), не зависит от константы A :

$$f_0^{\text{внутр}} \equiv \frac{1}{k} \frac{dR_0^{(+)\text{внутр}}}{dr}(a) / R_0^{(+)\text{внутр}}(a) = \frac{1}{ka} (ka \operatorname{ctg} ka - 1). \quad (6.19)$$

Для удобства последующего изложения введем функции $F_0(ka)$:

$$F_0(ka) \equiv ka f_0^{\text{внутр}} + 1. \quad (6.20)$$

В нашем случае

$$F_0(ka) = ka \operatorname{ctg} ka. \quad (6.21)$$

На основании формул (2.16), (4.10) и (4.13) можно написать

$$\eta_0 = \exp(2i\delta_0) = \exp(2i\delta_0^{(C)}) \frac{f_0^{\text{внутр}} - r_0(ka) + is_0(ka)}{f_0^{\text{внутр}} - r_0(ka) - is_0(ka)}. \quad (6.22)$$

Так как, согласно (4.9),

$$\operatorname{tg} \delta_0^{(C)} = \frac{j_0(ka)}{n_0(ka)} = \operatorname{tg}(-ka),$$

то

$$\delta_0^{(C)} = -ka. \quad (6.23)$$

Далее, пишем

$$\frac{h_0^{(1)'}(ka)}{h_0^{(1)}(ka)} \equiv r_0(ka) + is_0(ka) = -\frac{1}{ka} + i,$$

откуда вытекает, что

$$r_0(ka) = -\frac{1}{ka}, \quad s_0(ka) = 1. \quad (6.24)$$

Подставляя выражения (6.20), (6.23) и (6.24) в (6.22), получаем

$$\exp(2i\delta_0) = \exp(-2ika) \frac{F_0(ka) + ika}{F_0(ka) - ika}, \quad (6.25)$$

где

$$F_0(ka) = \sqrt{(ka)^2 + U_0 a^2} \operatorname{ctg} \sqrt{(ka)^2 + U_0 a^2} \quad (6.26)$$

есть четная функция аргумента ka . Разлагая функцию (6.26) при $ka \ll 1$ в ряд по степеням ka , получаем

$$F_0(ka) = F_0^{(1)} + F_0^{(2)}(ak)^2 + \dots \quad (6.27)$$

Сначала рассмотрим случай, когда $F_0^{(1)} \neq 0$. Пренебрегая в правой части (6.27) вторым и более высокими членами, перепишем (6.25) в виде

$$\exp(2i\delta_0) = \exp(-2ika) \frac{F_0^{(1)} + ika}{F_0^{(1)} - ika}. \quad (6.28)$$

Разлагая обе стороны (6.28) при малых ka в ряд, получаем для фазы δ_0 выражение

$$\delta_0 = -ka \left(1 - \frac{1}{F_0^{(1)}} \right) = -ka \left(1 - \frac{\operatorname{tg} a \sqrt{U_0}}{a \sqrt{U_0}} \right), \quad (6.29)$$

где

$$F_0^{(1)} = a \sqrt{U_0} \operatorname{ctg} a \sqrt{U_0}. \quad (6.30)$$

Упомянутое выше (гл. 3, § 3) соотношение (3.21) получается разложением (6.29) в ряд при малых $a \sqrt{U_0}$. Из (6.29) вытекает следующее выражение для полного сечения S -рассеяния ($l = 0$):

$$\sigma_0^{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx 4\pi a^2 \left(1 - \frac{1}{F_0^{(1)}} \right)^2. \quad (6.31)$$

В частности, если в (6.29) $F_0^{(1)} = 1$, то $\delta_0 = 0$ и рассеяние отсутствует. Вообще, при $\delta_l = n\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) $\sin \delta_l = 0$ и $\sigma_l^{\text{полн}} = 0$. Данное явление называют *эффектом Рамзауэра — Таунсенда*, оно наблюдается при столкновениях медленных электронов с атомами инертных газов.

Рассмотрим теперь случай, когда в (6.30) $F_0^{(1)} = 0$. Первый член правой части (6.27) в этом случае равен нулю и выражение (6.25) принимает вид

$$\eta_0 = \exp(2i\delta_0) = \exp(-2ika) \frac{(ka)^2 F_0^{(2)} + ika}{(ka^2) F_0^{(2)} - ika}. \quad (6.32)$$

Разлагая правую сторону при малых ka в ряд, получаем

$$\exp(2i\delta_0) \approx -1 + 2ika(1 + F_0^{(2)}), \quad (6.33)$$

или

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} - ka(1 + F_0^{(2)}), \quad (6.34)$$

откуда следует, что при $ka \rightarrow 0$ мы имеем $\delta_0 = \pi/2$ и сечение принимает максимально возможное значение (резонансное рассеяние). Такой резонанс называют *резонансом при нулевой энергии*. Полное сечение

$$\sigma_0^{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx \frac{4\pi}{k^2} \cos^2 [ka(1 + F_0^{(2)})] \approx \frac{4\pi}{k^2} \quad (6.35)$$

в данном случае расходится в пределе при $k \rightarrow 0$.

Чтобы понять, почему возник резонанс, сначала посмотрим внимательнее, как ведет себя волновая функция рассеяния в пределе $k \rightarrow 0$ при $F_0^{(1)} \neq 0$ и при $F_0^{(1)} = 0$. Согласно (3.14), вне ямы (при $r > a$) волновая функция $\psi_k^{(+)}(r)$ в приближении S -волны имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(r) &\approx \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \frac{1}{2} [\exp(2i\delta_0) h_0^{(1)}(kr) + h_0^{(2)}(kr)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \frac{\exp(i\delta_0) \cos \delta_0}{kr} [\sin kr + \operatorname{tg} \delta_0 \cos kr]. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Следовательно, в пределе при $k \rightarrow 0$ для $u_0^{\text{внешн}}(r)$ получаем

$$u_0^{\text{внешн}}(r) = r\psi_k^{(+)} = \operatorname{const} \left(r + \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\operatorname{tg} \delta_0}{k} \right). \quad (6.37)$$

Введем величину α :

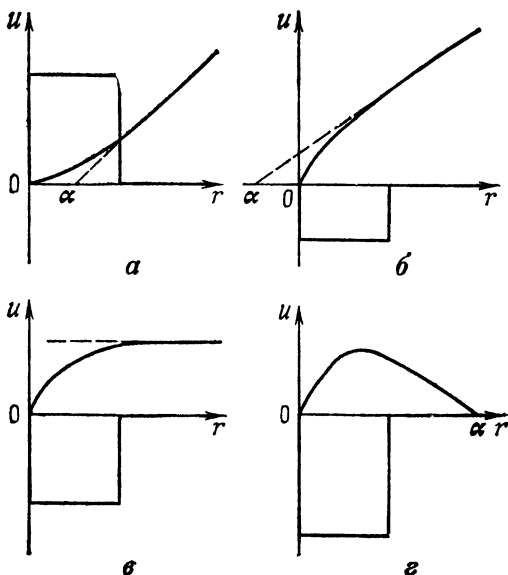
$$\alpha \equiv - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\operatorname{tg} \delta_0}{k}. \quad (6.38)$$

Тогда при $k \rightarrow 0$ волновая функция принимает вид

$$u_0^{\text{внешн}}(r) = \operatorname{const} (r - \alpha). \quad (6.39)$$

Величину α (6.39) называют *длиной рассеяния*. Рассмотрим сначала потенциал отталкивания. В этом

случае (фиг. 26, а) волновая функция вытесняется из области ненулевого потенциала наружу и в наружной области имеет вид прямой линии (6.39). Из чертежа ясно, что $\alpha > 0$ (длина рассеяния положительна).



Фиг. 26. Длина рассеяния.

В отличие от этого в случае потенциала притяжения возможны три варианта, показанные на фиг. 26, б—г. Согласно (6.29),

$$\begin{aligned} \alpha &= -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\operatorname{tg} \delta_0}{k} \approx a \left(1 - \frac{1}{F_0^{(1)}} \right) = \\ &= a \left(1 - \frac{\operatorname{tg} a \sqrt{U_0}}{a \sqrt{U_0}} \right) \approx -\frac{1}{3} a^3 U_0, \end{aligned} \quad (6.40)$$

откуда следует, что при $F_0^{(1)} < 1$, когда величина $a \sqrt{U_0}$ мала, т. е. мал потенциал, величина α отрицательна. Этот случай показан на фиг. 26, б. Если здесь

использовать понятие длины рассеяния, то (6.29) и (6.31) можно переписать в виде

$$\delta_0 = -k\alpha, \quad \sigma^{\text{полн}} = 4\pi\alpha^2. \quad (6.41)$$

Далее, если потенциал притяжения велик, а величина $F_0^{(1)}$ в формуле (6.30) равна нулю, то возникает резонанс при нулевой энергии. При этом в силу выражения (6.40) $\alpha \rightarrow -\infty$, а волновая функция $u(r)$ принимает вид, показанный на фиг. 26, в. Это станет понятнее, если рассмотреть соотношение

$$F_0(ka) = \frac{a \frac{du_0^{\text{внутр}}}{dr}(a)}{u_0^{\text{внутр}}(a)}, \quad (6.42)$$

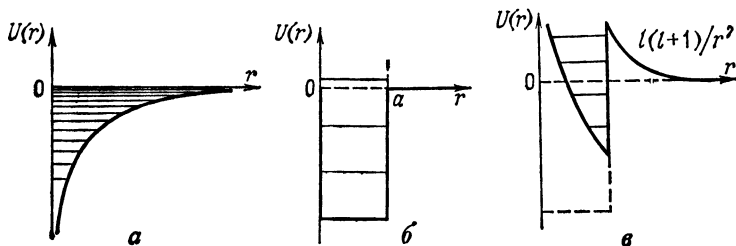
вытекающее из формул (6.19) и (6.20). Условие $F_0^{(1)} = 0$ означает, что в пределе при $k \rightarrow 0$ величина (6.42) обращается в нуль. Следовательно, обращается в нуль производная $du^{\text{внутр}}/dr$ при $r = a$. На фиг. 26, г показан случай еще более сильного потенциала притяжения, когда образуется *связанное состояние* и волновая функция при больших r стремится к нулю. Здесь величина α становится положительной.

Вернемся к вопросу о причинах появления резонанса. Резонанс при нулевой энергии (6.35) возникает, если выполняется условие

$$F_0^{(1)} = a \sqrt{U_0} \operatorname{ctg} a \sqrt{U_0} = 0. \quad (6.43)$$

Каков его смысл? На фиг. 27 показаны энергетические уровни связанных состояний для кулоновского потенциала и прямоугольной потенциальной ямы. Уровни устойчивых связанных состояний отрицательны. Предположим, что энергия частицы в области ненулевого потенциала несколько больше нуля. Кулоновский потенциал своей формой напоминает воронку, у него отсутствуют четко выраженные перегибы. Поэтому частица со сколь угодно малой положительной энергией удаляется на бесконечность и не может образовать даже временно связанного состояния. Прямоугольная же сферическая потенциальная яма, по-

казанная на фиг. 27, б, имеет ясно выраженный перегиб при $r = a$. Волна частицы с положительной энергией, находящейся в яме, отражается от этого перегиба, и часть ее выходит из ямы наружу. Причина отражения — резкое изменение волнового числа волновой функции при выходе волны из ямы наружу. Отраженная стенками ямы частица вновь и вновь бомбардирует стенки, пытаясь выбраться из ямы. Многократное отражение внутри ямы равносильно образованию



Фиг. 27. Энергетические уровни связанных и метастабильных состояний.

a — кулоновский потенциал; *b* — прямоугольная потенциальная яма; *в* — прямоугольная потенциальная яма и потенциал центробежной силы. Энергетические уровни показаны горизонтальными линиями: выше оси r — метастабильные, ниже оси r — уровни связанных состояний.

связанных состояний с дискретными положительными собственными значениями, при которых частица временно запирается внутри ямы. Связанные состояния с положительной энергией отличаются от связанных состояний с отрицательной энергией тем, что частица в конце концов уходит из ямы. Поэтому такие состояния называют *метастабильными*. До сих пор мы рассматривали только случай S -волны ($l = 0$). В случае P -волны ($l = 1$) и волн с большими значениями орбитального момента на потенциал прямоугольной потенциальной ямы накладывается потенциал центробежных сил. Форма ямы для этого случая показана на фиг. 27, *в*. Потенциал центробежных сил образует потенциальный барьер вне прямоугольной ямы. Следовательно, при этом образуются квазистационарные состояния, более стабильные, чем в случае S -волны, и

разрешены сравнительно более высокие дискретные собственные значения энергии. Если энергия падающей частицы соответствует метастабильному собственному значению, то возникают резонансные явления и сечение рассеяния становится необычно большим.

Рассмотрим с этой точки зрения эффект резонансного рассеяния для S -волны. Волновая функция внутри ямы (6.16) имеет вид

$$u_0^{\text{внутр}}(r) = A \sin \sqrt{k^2 + U_0} r. \quad (6.44)$$

Решение вне ямы дается формулой (6.36). Оно содержит сходящуюся и расходящуюся сферические волны. Но при резонансе сходящаяся волна отсутствует (решение выражается одной только расходящейся волной), потому что проникшая однажды в яму сходящаяся волна запирается в ней, образуя метастабильное состояние, а затем запертая в яме частица просачивается наружу и уходит из ямы. Итак, наружная волновая функция имеет вид расходящейся волны

$$u_0^{\text{внешн}}(r) = B \exp(ikr). \quad (6.45)$$

Согласно условию (1.17), волновая функция в яме (6.44) и волновая функция вне ямы (6.45) должны гладко и непрерывно переходить друг в друга, т. е. должно выполняться соотношение

$$F_0(ka) = a \frac{du_0^{\text{внешн}}}{dr}(a) / u_0^{\text{внешн}}(a). \quad (6.46)$$

Согласно (6.42),

$$F_0(ka) \equiv a \frac{du_0^{\text{внутр}}}{dr}(a) / u_0^{\text{внутр}}(a). \quad (6.47)$$

Подставляя (6.45) и (6.44) в (6.46) и (6.47), получаем

$$F_0(ka) \equiv a \sqrt{k^2 + U_0} \operatorname{ctg} a \sqrt{k^2 + U_0} = ika. \quad (6.48)$$

При $k = 0$ это равенство переходит в условие резонанса с нулевой энергией (6.43).

Соотношение (6.48) представляет собой уравнение на собственные значения. Оно налагает ограничения на возможные значения k . Но в правой части этого

уравнения стоит мнимая единица, ввиду чего его решения k комплексны. Комплексность собственных значений означает, что уравнение (6.48) не соответствует задаче о собственных значениях в строгой постановке. В частности, это отражается в том, что собственная функция, отвечающая комплексному собственному значению k , принадлежит нестабильному связанному состоянию. Рассмотрим теперь приближенное решение уравнения (6.48) при условии $|k| < U_0$. Первое приближение получаем, пренебрегая правой частью (6.48):

$$F_0(E_s) = a \sqrt{k_s^2 + U_0} \operatorname{ctg} a \sqrt{k_s^2 + U_0} = 0. \quad (6.49)$$

Решение этого уравнения таково:

$$a \sqrt{k_s^2 + U_0} = \left(n + \frac{1}{2} \pi\right), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Собственные значения энергии в данном случае принимают дискретный ряд значений:

$$E_s = \frac{\hbar^2}{2m} k_s^2 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} \pi\right)^2 - \frac{\hbar^2 U_0}{2m} \geq 0. \quad (6.50)$$

Если выполняется условие $\hbar^2 \pi^2 / 8m = V_0 a^2$, то при $n = 0$ мы имеем $E_s = 0$ и

$$F_0(0) = 0.$$

Это соответствует резонансу с нулевой энергией. Если глубина ямы несколько больше, чем $V_0 = \hbar^2 \pi^2 / 8ma^2$, то в окрестности $E = 0$ появляется метастабильное состояние и возникает резонанс при нулевой энергии.

В общем случае разложим левую часть (6.48), рассматриваемую как функция от $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, в ряд Тейлора в окрестности одного из решений (6.49). С учетом выражения (6.49) получим

$$\begin{aligned} F_0(ka) &= F_0(E_s) + \left(\frac{dF_0}{dE_k}\right)_s (E_k - E_s) + \dots = \\ &= \left(\frac{dF_0}{dE_k}\right)_s (E_k - E_s). \end{aligned} \quad (6.51)$$

Тогда соотношение (6.48) принимает вид

$$\left(\frac{dF_0}{dE_k}\right)_s (E_k - E_s) = ika,$$

или

$$E_k = E_s + \frac{ika}{\left(\frac{dF_0}{dE_k}\right)_s}. \quad (6.52)$$

Введем величину

$$\Gamma_s = -\frac{2ka}{\left(\frac{dF_0}{dF_k}\right)_s}, \quad (6.53)$$

называемую *шириной резонанса*, и перепишем выражение (6.52) в виде

$$E_k = E_s - \frac{i}{2} \Gamma_s, \quad (6.54)$$

а (6.51) — в виде

$$F_0(ka) = -\frac{2ka}{\Gamma_s} (E_k - E_s). \quad (6.55)$$

Подставив (6.55) в (6.25), получим

$$\eta_0 = \exp(2i\delta_0) = \exp(-2ika) \frac{-2(E_k - E_s) + i\Gamma_s}{-2(E_k - E_s) - i\Gamma_s}, \quad (6.56)$$

что равносильно соотношению

$$\operatorname{tg}(\delta_0 + ka) = \frac{\Gamma_s}{2(E_s - E_k)}, \quad (6.57)$$

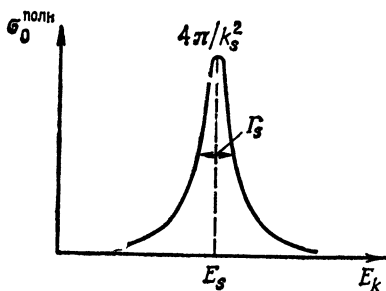
из которого ясно, что при $E_k = E_s$

$$\delta_0 + ka = \frac{\pi}{2}. \quad (6.58)$$

Подставляя (6.25) и (6.55) в формулу для полного сечения (2.12), получаем

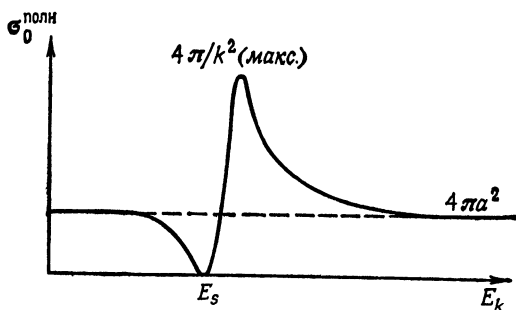
$$\begin{aligned} \sigma_0^{\text{полн}} &= \frac{\pi}{k^2} |1 - \exp(2i\delta_0)|^2 = \\ &= \frac{\pi}{k^2} \left| \frac{2ika}{F_0(ka) - ika} + 1 - \exp(2ika) \right|^2 = \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \left| \frac{\Gamma_s/2}{(E_k - E_s) + i\Gamma_s/2} + \exp(ika) \sin ka \right|^2. \quad (6.59) \end{aligned}$$

Первый член последней из форм (6.59) учитывает резонансное рассеяние, а второй — рассеяние на потенциале твердого шара. Если энергия падающей частицы



Фиг. 28. Сечение резонансного рассеяния.

E_k достаточно далека от энергетического уровня E_s метастабильного состояния, то вкладом первого члена можно пренебречь и получится результат, соответ-



Фиг. 29. Интерференция потенциального и резонансного рассеяния.

ствующий полному сечению рассеяния на твердом шаре в случае S-волны:

$$\sigma_0^{\text{полн}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 ka \approx 4\pi a^2. \quad (6.60)$$

Если величина ka мала, а величина E_k близка к энергетическому уровню E_s , то, наоборот, можно пре-

небрежь вкладом второго слагаемого последней из форм (6.59), оставив только первое слагаемое. Тогда полное сечение выразится формулой

$$\sigma_0^{\text{полн}} = \frac{\pi}{k_s^2} \frac{\Gamma_s^2}{(E_k - E_s)^2 + (\Gamma_s/2)^2}, \quad (6.61)$$

в которой всюду, кроме E_k , величина k заменена величиной k_s ввиду того, что сечение (6.61) имеет острый максимум (фиг. 28). Согласно формуле (6.58), в данном случае $\delta_0 \approx \pi/2$, как и должно быть в случае резонансного рассеяния. В действительности же резкая картина резонансного рассеяния наблюдается только, если величина ka мала, а собственное значение энергии метастабильного состояния чуть-чуть больше нуля. Для более высоких энергетических уровней резкий максимум, показанный на фиг. 28, пропадает. Сечение (6.61) достигает максимума при $E_k = E_s$, а величина Γ_s есть ширина максимума при значении сечения, равном половине максимального («на половине высоты»). Поэтому Γ_s называют полушириной максимума резонансного рассеяния. Формулу (6.61) называют *формулой Брейта — Вигнера с одним уровнем*.

Первый и второй члены формулы (6.59), вообще говоря, интерферируют. Интерференция максимальна при $E_k = E_s$ и $ka = \pi/2$. Тогда величина δ_0 в формуле (6.58) равна нулю, а следовательно, $\sigma_0^{\text{полн}} = 0$. Зависимость полного сечения (6.59) от энергии E_k представлена на фиг. 29.

Нестационарная теория рассеяния

§ 1. Представление Гейзенберга и представление взаимодействия

В гл. 2 и 3 при рассмотрении задачи рассеяния мы исходили из стационарного уравнения Шредингера. Состояние рассеяния мы представляли в виде суперпозиции плоской (падающая частица) и сферической (рассеянная частица) волн, а сечение рассеяния находили с помощью амплитуды сферической волны. Такой подход в сущности тождествен подходу к задаче о рассеянии волн в классической физике. Единственное отличие от классической теории рассеяния волн состоит в том, что в квантовой механике волновая функция интерпретируется как волна вероятности. Но в гл. 2, в начале § 2, мы указывали на другой возможный подход к решению задачи о рассеянии, состоящий в том, чтобы следить за ходом временных изменений квантового состояния системы и определять вероятности перехода этого состояния в конечное состояние, наблюдаемое в данный момент. Это чисто квантовый подход, не имеющий аналога в классической физике. Он применим не только к рассмотренной в гл. 2 и 3 сравнительно простой задаче о взаимном рассеянии двух тел, взаимодействие которых характеризуется неким потенциалом, но также к рассеянию на мишенях, имеющих сложное строение, и к системам квантованных полей. В этом смысле излагаемая в данной главе теория рассеяния — более общая, чем теория, изложенная в предыдущих главах.

Перестраивая с указанной точки зрения теорию рассеяния, мы покажем, в частности, что выводы из этой новой формы теории, если ее применить к простому частному случаю потенциального рассеяния в

системе двух частиц, полностью соответствуют результатам гл. 2.

Прежде чем начинать построение нестационарной теории рассеяния, остановимся сначала на способах описания изменения квантовой системы со временем. Для этой цели чаще всего пользуются *представлением Шредингера*, в котором принимают, что волновая функция $\Psi_S(t)$ изменяется со временем, согласно уравнению Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_S(t)}{\partial t} = H \Psi_S(t), \quad (1.1)$$

а операторы физических величин от времени не зависят. В уравнении (1.1) H — оператор энергии (полный гамильтониан системы), являющийся функцией канонически сопряженных эрмитовых операторов, удовлетворяющих перестановочным соотношениям

$$[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{i,j}, \quad [q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0. \quad (1.2)$$

Шредингеровокому представлению противопоставляется *представление Гейзенберга*, в котором волновая функция от времени не зависит, а операторы физических величин изменяются с течением времени. Пусть в момент $t = 0$ волновая функция есть Ψ ; тогда в момент t , согласно уравнению Шредингера (1.1), волновая функция будет равна

$$\Psi_S(t) = \exp(-iHt/\hbar) \Psi. \quad (1.3)$$

Это — формальное решение уравнения Шредингера (1.1). Пусть A — оператор некоторой физической величины в представлении Шредингера. Разумеется, оператор A эрмитов. Вообще говоря, он является функцией координат q_1, \dots, q_N и импульсов p_1, \dots, p_N . Кроме того, следовало бы ввести зависимость A от операторов спина. Но учет спина не изменит последующих выводов. Поэтому ради простоты спин мы опустим. Среднее значение оператора A в момент t дается выражением

$$\langle \Psi_S(t) | A | \Psi_S(t) \rangle, \quad (1.4)$$

в котором применены символы скобок Дирака. В подробной записи формула (1.4) выглядит так:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_S(t) | A | \Psi_S(t) \rangle &\equiv \\ &\equiv \int \Psi_S^*(q_1, q_2, \dots, q_N; t) A(q_1, q_2, \dots, q_N; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_N}) \times \\ &\quad \times \Psi_S(q_1, q_2, \dots, q_N; t) dq_1 dq_2, \dots, dq_N. \end{aligned}$$

Подставив величину (1.4) в выражение (1.3), перепишем его в виде

$$\begin{aligned} \langle \Psi_S(t) | A | \Psi_S(t) \rangle &= \langle \Psi | \exp(iHt/\hbar) A \exp(-iHt/\hbar) | \Psi \rangle \equiv \\ &\equiv \langle \Psi | \mathbf{A}(t) | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (1.5)$$

где $\mathbf{A}(t)$ — оператор, определяемый выражением

$$\mathbf{A}(t) \equiv \exp(iHt/\hbar) A \exp(-iHt/\hbar), \quad (1.6)$$

который изменяется со временем. Представление, в котором операторы физических величин изменяются со временем по закону (1.6), а волновые функции от времени не зависят, называют представлением Гейзенберга.

В формуле (1.6) гейзенберговский оператор обозначен жирной буквой. Но это не означает, что он вектор, просто этим подчеркивается сложность гейзенберговских операторов (как мы увидим ниже, в них учтено влияние взаимодействия). При выводе формулы (1.6) из (1.5) мы рассматривали среднее значение оператора A . Но для ее вывода можно взять произвольный матричный элемент. Тогда для произвольной полной системы мы получим соотношение, эквивалентное соотношению (1.5), откуда будет следовать, что для операторов справедливо соотношение (1.6). Рассматривая (1.3) и (1.6), видим, что при $t = 0$ шредингеровское и гейзенберговское представления совпадают. Момент $t = 0$ выбран ради удобства. Если взять другой момент времени t_0 и принять, что волновая функция в этот момент есть Ψ , то будет

$$\Psi_S(t) = \exp\{-iH(t - t_0)/\hbar\} \Psi,$$

а оператор в гейзенберговском представлении примет вид

$$\mathbf{A}(t) = \exp\{iH(t - t_0)/\hbar\} A \exp\{iH(t - t_0)/\hbar\}.$$

Но в нашей книге всюду принято $t_0 = 0$. Этот момент времени нужно определить один раз и не менять его на промежуточных этапах рассмотрения. Иначе неизбежны путаница и недоразумения. Преобразование (1.6) не изменяет вида канонических перестановочных соотношений (1.2)

$$[q_i(t), p_j(t)] = i\hbar\delta_{i,j}, \quad [q_i(t), q_j(t)] = [p_i(t), p_j(t)] = 0. \quad (1.7)$$

В самом деле, например:

$$\begin{aligned} [q_i(t), p_j(t)] &= e^{iHt/\hbar} q_i e^{-iHt/\hbar} \cdot e^{iHt/\hbar} p_j e^{-iHt/\hbar} - \\ &\quad - e^{iHt/\hbar} p_j e^{-iHt/\hbar} \cdot e^{iHt/\hbar} q_i e^{-iHt/\hbar} = \\ &= \exp(iHt/\hbar) [q_i, p_j] \exp(-iHt/\hbar) = \\ &= i\hbar\delta_{i,j} \exp(iHt/\hbar) \exp(-iHt/\hbar) = i\hbar\delta_{i,j}. \end{aligned}$$

Следовательно, (1.6) — каноническое преобразование.

Дифференциальное уравнение, которым определяется зависимость от времени оператора $\mathbf{A}(t)$ в представлении Гейзенберга, получается дифференцированием соотношения (1.6) по времени и имеет вид

$$\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \exp(iHt/\hbar) [H, \mathbf{A}] \exp(-iHt/\hbar) = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{A}(t)]. \quad (1.8)$$

Это операторное уравнение называют *гейзенберговским уравнением движения*. В представлении Гейзенберга оно играет такую же роль, как и уравнение (1.1) в представлении Шредингера. При вычислениях с этим уравнением, вообще говоря, нельзя изменять порядок следования операторов A и H . Так как оператор H коммутирует сам с собой, можно пользоваться соотношением

$$\mathbf{H} = \exp(iHt/\hbar) H \exp(-iHt/\hbar) = H. \quad (1.9)$$

Чтобы предупредить возможные недоразумения, поясним смысл формулы (1.9). Гамильтониан в представлении Шредингера является функцией канонических операторов

$$q_1, q_2, \dots, q_N; \quad p_1, p_2, \dots, p_N,$$

удовлетворяющих перестановочным соотношениям (1.2), т. е.

$$H = H(q_1, q_2, \dots, q_N; p_1, p_2, \dots, p_N).$$

Преобразуя эту функцию к представлению Гейзенберга, получаем

$$\begin{aligned} H(q_1, \dots, p_N) &= \exp(iHt/\hbar) H(q_1, \dots, p_N) \exp(-iHt/\hbar) = \\ &= H(e^{iHt/\hbar} q_1 e^{-iHt/\hbar}, \dots, e^{iHt/\hbar} p_N e^{-iHt/\hbar}) = \\ &= H(q_1(t), \dots, p_N(t)). \end{aligned}$$

Это значит, что, пользуясь жирным шрифтом, соотношение (1.9) можно записать в виде

$$\mathbf{H} = H(\mathbf{q}_1(t), \mathbf{q}_2(t), \dots, \mathbf{q}_N(t); \mathbf{p}_1(t), \mathbf{p}_2(t), \dots, \mathbf{p}_N(t)), \quad (1.10)$$

где $\mathbf{q}_i(t)$, $\mathbf{p}_i(t)$ — операторы в представлении Гейзенберга, удовлетворяющие перестановочным соотношениям (1.7). Отметим, что оператор H в последнем перестановочном соотношении формулы (1.8) имеет смысл оператора (1.10). Форма функциональной зависимости $H(\mathbf{q}_1(t), \dots, \mathbf{p}_N(t))$ в (1.10), такая же, как в $H(q_1, \dots, p_N)$, а в силу соотношения (1.9) они равны и как операторы.

Гейзенберговские уравнения движения (1.8) являются операторными уравнениями, по своей форме соответствующими каноническим уравнениям движения классической механики. Чтобы показать это, положим в (1.8) $\mathbf{A}(t) = \mathbf{q}_i(t)$. Тогда перестановочные соотношения (1.7) дают

$$\frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{q}_i(t)] = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i(t)},$$

откуда

$$\frac{d\mathbf{q}_i(t)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i(t)}. \quad (1.11)$$

Далее, полагая $\mathbf{A}(t) = \mathbf{p}_i(t)$ и учитывая соотношение

$$\frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{p}_i(t)] = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_i(t)},$$

получаем

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial q_i(t)}. \quad (1.12)$$

Очевидно, что уравнения (1.11) и (1.12) имеют вид классических уравнений движения.

В классической механике механические величины $q_i^{(c)}(t)$, $p_i^{(c)}(t)$ определяются как решения канонических уравнений движения [по форме совпадающих с уравнениями (1.11) и (1.12)], в которых время t играет роль параметра. В квантовой же механике при ее формулировке в представлении Шредингера (обычно квантовую механику начинают изучать в этой форме) механические величины q_i , p_i представляют не зависящими от времени операторами, удовлетворяющими перестановочным соотношениям (1.2) [например, в представлении, в котором оператор q_i диагонален] согласно (1.2), $p_i = (\hbar/i)(\partial/\partial q_i)$, а изменение механической системы со временем целиком включают во временную зависимость амплитуды вероятности $\Psi_S(t)$ — величины, не имеющей классического аналога. В связи с этим студент, впервые знакомящийся с квантовой механикой по представлению Шредингера, в котором методы описания природы не имеют ничего общего с методами классической физики, испытывает крайнюю растерянность и чувство неудовлетворенности. В этом смысле представление Гейзенберга выгодно отличается тем, что в нем так же, как и в классической механике, механические величины $q_i(t)$, $p_i(t)$ зависят от времени, а уравнения движения (1.11) и (1.12) имеют ту же самую форму, что и классические уравнения. Гейзенберговское представление проясняет соответствие между классической и квантовой механикой и способствует более глубокому пониманию последней. В отличие от классической механики механические величины $A(t)$ в представлении Гейзенберга — операторы, и, чтобы получить численные значения, соответствующие классическим механическим величинам, нужно брать среднее значение этих операторов $\langle \Psi | A(t) | \Psi \rangle$.

Допустим, что в представлении Шредингера гамильтониан H можно разбить на два слагаемых:

$$H = H_0 + V. \quad (1.13)$$

В задачах о рассеянии H_0 — обычно гамильтониан падающей частицы и мишени, а V — гамильтониан взаимодействия между ними. Оператор H_0 будем называть свободным гамильтонианом, а оператор V — гамильтонианом взаимодействия. Например, в случае потенциального рассеяния в системе двух частиц, рассмотренном в гл. 2 и 3, H_0 представляет энергию относительного движения двух частиц (после отделения движения центра тяжести), а V — потенциала взаимодействия частиц. В случае (1.13) уравнение движения в представлении Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_S(t)}{\partial t} = (H_0 + V) \Psi_S(t). \quad (1.14)$$

Пользуясь свободным гамильтонианом, произведем следующее преобразование:

$$\Psi(t) \equiv \exp(iH_0 t/\hbar) \Psi_S(t). \quad (1.15)$$

Волновая функция $\Psi(t)$, даваемая формулой (1.15), удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = V(t) \Psi(t), \quad (1.16)$$

где

$$V(t) = \exp(iH_0 t/\hbar) V \exp(-iH_0 t/\hbar). \quad (1.17)$$

В самом деле, продифференцируем формулу (1.15) по времени. Учитывая уравнение (1.14) и помня, что H_0 и V , вообще говоря, не коммутируют, получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} &= i\hbar \left[\frac{i}{\hbar} H_0 \exp(iH_0 t/\hbar) \Psi_S(t) + \exp(iH_0 t/\hbar) \frac{\partial \Psi_S(t)}{\partial t} \right] = \\ &= -H_0 \Psi(t) + \exp(iH_0 t/\hbar) (H_0 + V) \exp(-iH_0 t/\hbar) \Psi(t) = \\ &= V(t) \Psi(t). \end{aligned}$$

В общем случае, пользуясь преобразованием (1.15), для среднего значения произвольного оператора A в представлении Шредингера можно написать

$$\begin{aligned} & \langle \Psi_S(t) | A | \Psi_S(t) \rangle = \\ & = \langle \Psi(t) | \exp(iH_0t/\hbar) A \exp(-iH_0t/\hbar) | \Psi(t) \rangle = \\ & = \langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle, \end{aligned} \quad (1.18)$$

где

$$A(t) = \exp(iH_0t/\hbar) A \exp(-iH_0t/\hbar). \quad (1.19)$$

Дифференцируя формулу (1.19) по времени и действуя так же, как и при выводе формулы (1.8), приходим к уравнению движения для оператора $A(t)$:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_0, A(t)], \quad (1.20)$$

из которого видно, что в отличие от оператора $A(t)$ в представлении Гейзенберга зависимость оператора $A(t)$ от времени определяется только свободным гамильтонианом H_0 [гамильтониан взаимодействия $V(t)$ на оператор $A(t)$ не влияет]. Изменение же волновой функции со временем в данном случае, как видно из уравнения (1.16), определяется гамильтонианом взаимодействия $V(t)$. Таким образом, представление, задаваемое формулами (1.15) и (1.19), является промежуточным между представлениями Шредингера и Гейзенберга. Его называют *представлением взаимодействия*.

Полагая в формуле (1.19) $A = H_0$, получаем

$$\begin{aligned} & H_0(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N) = \\ & = \exp(iH_0t/\hbar) H_0(q_1, \dots, q_N; p_1, \dots, p_N) \exp(-iH_0t/\hbar) = \\ & = H_0(e^{iH_0t/\hbar} q_1 e^{-iH_0t/\hbar}, \dots, e^{iH_0t/\hbar} p_N e^{-iH_0t/\hbar}) = \\ & = H_0(q_1(t), \dots, q_N(t); p_1(t), \dots, p_N(t)). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Это значит, что преобразованный свободный гамильтониан как оператор равен непреобразованному H_0 и что преобразование (1.19) не изменяет форму зависимости H_0 от динамических переменных. Далее, H_0 в правой части уравнения (1.20) нужно рассматривать

как оператор, имеющий последнюю из форм (1.21). Следовательно, операторы $q_i(t)$, $p_i(t)$, получаемые как решения уравнения (1.20), определяются только свободным гамильтонианом H_0 и не испытывают влияния взаимодействия. Оператор

$$H_0 = H_0(q_1(t), \dots, q_N(t); p_1(t), \dots, p_N(t)) \quad (1.22)$$

представляет энергию свободной системы. Заметим, однако, что величина

$$H_0(q_1(t), \dots, p_N(t)) + V(q_1(t), \dots, q_N(t)) \quad (1.23)$$

не имеет смысла полной энергии системы с учетом взаимодействия. Полная энергия всей системы

$$\begin{aligned} H_0(q_1(t), \dots, p_N(t)) + V(q_1(t), \dots, q_N(t)) = \\ = H_0(q_1, \dots, p_N) + V(q_1, \dots, q_N) \end{aligned} \quad (1.24)$$

определяется либо гейзенберговскими операторами $q_i(t)$, $p_i(t)$, либо операторами в представлении Шредингера q_i , p_i . Это естественно. Рассмотрим, например, частицу, движущуюся под действием силы тяжести в классической механике. Чтобы получить полную энергию системы, в формулу (1.24) нужно подставить решения $q_i^{(c)}(t)$, $p_i^{(c)}(t)$ уравнений движения в поле тяжести. Если же подставить величины $q_i^{(c)}(t)$, $p_i^{(c)}(t)$, описывающие свободное движение (не подверженное влиянию силы тяжести), аналогичные величинам в формуле (1.23), то результат не даст полной энергии системы.

Представление взаимодействия, определенное формулами (1.15) и (1.19), при $t = 0$ совпадает с представлением Шредингера. Так же как и при переходе от представления Шредингера к представлению Гейзенберга, выбор момента времени, в который рассматриваемые представления совпадают, определяется соображениями удобства. Можно было бы считать, что представления взаимодействия и Шредингера совпадают в некоторый момент времени t_1 , не равный нулю. Иногда принимают $t_1 = -\infty$. Следует иметь в виду, что разные исследователи выбирают этот момент времени по-разному.

Преобразование, определенное формулами (1.15) и (1.19), не изменяет канонических перестановочных соотношений (1.2). В самом деле

$$[q_i(t) p_j(t)] = \exp(iH_0 t/\hbar) [q_i p_j] \exp(-iH_0 t/\hbar) = i\hbar \delta_{i,j}. \quad (1.25)$$

Остальные перестановочные соотношения тоже не изменяются:

$$[q_i(t), q_j(t)] = [p_i(t), p_j(t)] = 0. \quad (1.26)$$

Следовательно, преобразование от представления Шредингера к представлению взаимодействия — каноническое.

Одно из достоинств представления взаимодействия состоит в том, что для простых свободных гамильтонианов H_0 можно решить уравнение движения операторов физических величин (1.20), тогда как уравнения движения (1.8) в представлении Гейзенберга решить почти никогда не удастся. Оператор $\mathbf{A}(t)$ в представлении Гейзенберга — крайне сложный оператор. Сложность его обусловлена тем, что в нем полностью учтено взаимодействие. Именно чтобы подчеркнуть это обстоятельство, мы и обозначаем в данной книге гейзенберговские операторы жирными буквами. В квантовой теории поля гейзенберговские операторы называют «одетыми операторами». И наоборот, об операторах в представлении взаимодействия говорят, как о «голых операторах». Это значит, в частности, что в отличие от оператора $\mathbf{A}(t)$ оператор $A(t)$, так же как и оператор в представлении Шредингера, имеет вполне ясный смысл. Поясним это примером. Гамильтониан частицы в поле потенциала V в представлении Шредингера дается формулой

$$H = H_0 + V = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V. \quad (1.27)$$

Операторы $q_i(t)$, $p_i(t)$ ($i = 1, 2, 3$) в представлении взаимодействия суть решения уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dq_i(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2m} p_i^2(t), q_i(t) \right] = \frac{1}{m} p_i(t), \\ \frac{dp_i(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2m} p_i^2(t), p_i(t) \right] = 0. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Пусть в начальный момент времени t' операторы будут $q_i(t')$, $p_i(t')$. Тогда в произвольный момент времени t , согласно уравнениям (1.28), эти операторы выразятся формулами

$$\begin{aligned} q_i(t) &= \frac{1}{m} p_i(t')(t - t') + q_i(t'), \\ p_i(t) &= p_i(t'). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Уравнения движения для гейзенберговских операторов решить не удастся (если не считать небольшого числа случаев крайне простых взаимодействий). С помощью решений (1.29) можно определить перестановочные соотношения в разные моменты времени. Например, пользуясь перестановочными соотношениями в одинаковые моменты времени (1.25) и (1.26), можно вывести соотношение

$$\begin{aligned} [q_i(t) q_i(t')] &= \left[\frac{p_i(t')}{m} (t - t') + q_i(t'), q_i(t') \right] = \\ &= \frac{(t - t')}{m} [p_i(t'), q_i(t')] = \frac{\hbar}{im} (t - t'), \end{aligned} \quad (1.30)$$

из которого видно, что операторы, коммутирующие в одинаковые моменты времени, вообще говоря, не коммутируют, если моменты времени различны. В частности,

$$[V(t), V(t')] \neq 0. \quad (1.31)$$

Такова же ситуация в представлении Гейзенберга: два оператора, коммутирующие в одинаковые моменты времени, в разные моменты времени, вообще говоря, не коммутируют. Но в представлении Гейзенберга в отличие от представления взаимодействия, как правило, невозможно выписать явно величину коммутатора.

Хорошо известно, что в теории относительности понятие одновременности зависит от выбора системы отсчета. В связи с этим в релятивистской квантовой теории поля очень важно доказать, что обычная процедура квантования (при которой коммутаторы полевых величин определяют в одинаковые моменты времени) имеет лоренц-инвариантный смысл. Для дока-

зательства этого нужно вывести значения коммутаторов в разные моменты времени и доказать ковариантность полученных величин относительно преобразований Лоренца. Но в представлении Шредингера операторы не зависят от времени и ковариантность коммутаторов показать невозможно. В представлении Гейзенберга невозможно записать вид коммутатора в разные моменты времени. Поэтому для доказательства ковариантности коммутаторов приходится применять сложный математический аппарат. В представлении же взаимодействия коммутаторы в разные моменты времени определить легко и ковариантность их ясна с первого взгляда. В известных работах Томонага — Швингера квантовая теория поля перестроена на основе представления взаимодействия так, что ковариантность коммутаторов и других основных уравнений движения непосредственно очевидна.

С помощью канонических преобразований (1.3) и (1.6) мы перешли от представления Шредингера к представлению Гейзенберга, а с помощью (1.15) и (1.19) — от представления Шредингера к представлению взаимодействия. А каково преобразование, связывающее представление Гейзенберга с представлением взаимодействия? Произведя в формуле (1.6) преобразование, обратное преобразованию (1.19),

$$A = \exp(-iH_0t/\hbar) A(t) \exp(+iH_0t/\hbar),$$

получим, что оператор $A(t)$ в представлении Гейзенберга связан с оператором $A(t)$ в представлении взаимодействия преобразованием

$$A(t) = \exp(iHt/\hbar) \exp(-iH_0t/\hbar) A(t) \exp(iH_0t/\hbar) \times \\ \times \exp(-iHt/\hbar). \quad (1.32)$$

Кроме того, гейзенберговская волновая функция связана с волновой функцией в представлении взаимодействия соотношением

$$\Psi = \exp(iHt/\hbar) \exp(-iH_0t/\hbar) \Psi(t), \quad (1.33)$$

при выводе которого нужно воспользоваться соотношениями (1.3) и (1.15). Преобразование, обратное (1.33), дается формулой

$$\Psi(t) = \exp(iH_0 t/\hbar) \exp(-iHt/\hbar) \Psi, \quad (1.34)$$

в которой H и H_0 — гамильтонианы в представлении Шредингера. Так как H и H_0 , вообще говоря, не коммутируют, нужно следить за порядком следования двух экспонент в формулах (1.32), (1.33) и (1.34).

Вернемся к уравнению (1.16), определяющему изменение волновой функции со временем в представлении взаимодействия. Введем оператор $U(t, t')$, связывающий волновую функцию $\Psi(t')$ в момент t' с волновой функцией $\Psi(t)$ в момент t :

$$\Psi(t) = U(t, t') \Psi(t'). \quad (1.35)$$

Чтобы найти явный вид этого оператора, подставим выражение (1.34) в (1.35):

$$\begin{aligned} \exp(iH_0 t/\hbar) \exp(-iHt/\hbar) \Psi &= \\ &= U(t, t') \exp(iH_0 t'/\hbar) \exp(-iHt'/\hbar) \Psi. \end{aligned}$$

Полученное соотношение справедливо для любой волновой функции, а поэтому должно выполняться операторное соотношение

$$\begin{aligned} \exp(iH_0 t/\hbar) \exp(-iHt/\hbar) &= \\ &= U(t, t') \exp(iH_0 t'/\hbar) \exp(-iHt'/\hbar). \end{aligned}$$

Действуя на обе части этого равенства слева обратными операторами, приходим к формуле, выражающей оператор временных изменений волновой функции в представлении взаимодействия через шредингеровские операторы H и H_0 :

$$\begin{aligned} U(t, t') &= \exp(iH_0 t/\hbar) \exp\{-iH(t-t')/\hbar\} \times \\ &\times \exp(-iH_0 t'/\hbar). \quad (1.36) \end{aligned}$$

На основании формулы (1.36) можно доказать следующие свойства оператора $U(t, t')$:

$$\begin{aligned} U(t, t) &= 1, \\ U(t, t'') &= U(t, t') U(t', t''), \\ U^\dagger(t', t) &= U(t, t'), \\ U^\dagger(t, t') U(t, t') &= U(t, t') U^\dagger(t, t') = 1. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Здесь через U^\dagger обозначен эрмитово-сопряженный оператор. Свойства (1.37) эквивалентны утверждению, что множество операторов U образует *группу*. Формулы (1.32) и (1.33), связывающие гейзенберговское представление с представлением взаимодействия, можно на основании формулы (1.36) преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \Psi &= U(0, t) \Psi(t), \\ A(t) &= U(0, t) A(t) U(t, 0). \end{aligned} \quad (1.38)$$

В формуле (1.36) оператор U выражается через операторы в представлении Шредингера. А как выразить его через операторы в представлении взаимодействия? Чтобы ответить на этот вопрос, подставим выражение (1.35) в формулу (1.16):

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t')}{\partial t} \Psi(t') = V(t) U(t, t') \Psi(t').$$

Так как $\Psi(t')$ — произвольная волновая функция, справедливо операторное соотношение

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t')}{\partial t} = V(t) U(t, t'). \quad (1.39)$$

Пользуясь тем, что $U(t', t') = 1$ [формулы (1.37)], представим соотношение (1.39) в виде интегрального уравнения

$$U(t, t') = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t V(t'') U(t'', t') dt'', \quad (1.40)$$

позволяющего выразить оператор U через оператор $V(t)$ в представлении взаимодействия.

Чтобы выразить U в уравнении (1.40) только через гамильтониан взаимодействия $V(t)$, нужно итериро-

вать это уравнение, т. е. многократно подставлять U из левой части в правую часть. Прделав это, получим ряд

$$\begin{aligned}
 U(t, t') &= 1 + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_{t'}^t V(t_1) dt_1 + \\
 &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) + \dots \\
 \dots &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n V(t_1) V(t_2) \dots V(t_n).
 \end{aligned} \tag{1.41}$$

Так как $V(t)$ в правой части ряда — операторы в представлении взаимодействия, следует иметь в виду, что они, как отмечено в соотношении (1.31), вообще говоря, не коммутируют. Чтобы сделать одинаковыми верхние пределы многократных интегралов по времени в правой части (1.41), воспользуемся ступенчатой функцией $\theta(t)$:

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{при } t > 0, \\ 0 & \text{при } t < 0, \end{cases} \tag{1.42}$$

с помощью которой перепишем ряд (1.41) в виде

$$\begin{aligned}
 U(t, t') &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \dots \\
 &\dots \int_{t'}^t dt_n \theta(t_1 - t_2) \cdot \theta(t_2 - t_3) \dots \\
 &\dots \theta(t_{n-1} - t_n) V(t_1) V(t_2) \dots V(t_n).
 \end{aligned} \tag{1.43}$$

Введем оператор P :

$$\begin{aligned}
 P(V(t_1) V(t_2) \dots V(t_n)) &\equiv \\
 &\equiv \sum_{P(1, 2, \dots, n)} \theta(t_1 - t_2) \theta(t_2 - t_3) \dots \theta(t_{n-1} - t_n) \times \\
 &\times V(t_1) V(t_2) \dots V(t_n),
 \end{aligned} \tag{1.44}$$

где сумма взята по всевозможным перестановкам n параметров t_1, t_2, \dots, t_n . Такой оператор P называют *хронологическим оператором Дайсона*. Если выражение (1.44) проинтегрировать по t_1, t_2, \dots, t_n от t' до t и в каждом слагаемом правой части соответствующим образом переписать подынтегральную функцию, то все $n!$ слагаемых окажутся одинаковыми. Следовательно, с учетом определения (1.44) ряд (1.43) можно переписать в виде

$$U(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^t dt_2 \dots \dots \int_{t'}^t dt_n P(V(t_1) V(t_2) \dots V(t_n)). \quad (1.45)$$

Ряд (1.45) называют *разложением Дайсона*. В этой формуле оператор $U(t, t')$ выражается через оператор в представлении взаимодействия $V(t)$ в наиболее симметричной форме.

В заключение настоящего параграфа представим интегральное уравнение (1.40) для $U(t, t')$ в несколько иной форме (это понадобится нам в дальнейшем). Дифференцируя обе части равенства (1.35) по t' , получаем

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t'} = 0 = i\hbar \frac{\partial U(t, t')}{\partial t'} \Psi(t') + i\hbar U(t, t') \frac{d\Psi(t')}{dt'} = \\ = i\hbar \frac{\partial U(t, t')}{\partial t'} \Psi(t') + U(t, t') V(t') \Psi(t').$$

Ввиду произвольности $\Psi(t')$ имеет место дифференциальное уравнение

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t')}{\partial t'} = -U(t, t') V(t'), \quad (1.46)$$

от которого, так же как и в случае (1.40), переходим к интегральному уравнению

$$U(t, t') = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt'' U(t, t'') V(t''). \quad (1.47)$$

§ 2. Теория S-матрицы

В данном параграфе мы начнем строить нестационарную теорию рассеяния, в основе которой лежит учет изменения состояния системы со временем. Для большей ясности при изложении все время будем иметь в виду рассеяние двух частиц — протона и нейтрона. Задолго до столкновения частицы находятся на достаточно большом расстоянии друг от друга, между ними нет взаимодействия, и они движутся свободно и независимо. Постепенно они сближаются, взаимодействуют друг с другом, а затем снова расходятся как свободные частицы. Чтобы описать протекание такого процесса во времени, удобно воспользоваться представлением взаимодействия. Начальный момент времени (перед столкновением) можно взять в бесконечном прошлом, а конечный момент (когда столкновение закончилось) — в бесконечном будущем, когда частицы рассеялись. При $t = -\infty$ частицы не взаимодействуют [в уравнении (1.16) гамильтониан взаимодействия $V(-\infty)$ равен нулю], находясь в некотором собственном состоянии $\Psi(-\infty)$ свободного гамильтониана. Это значит, что при $t = -\infty$ мы вводим следующее начальное состояние:

$$\Psi(-\infty) = \Phi_i, \quad H_0 \Phi_i = E_i \Phi_i. \quad (2.1)$$

Волновые функции Φ_i удовлетворяют условиям ортогональности и нормировки

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \delta_{i,j}. \quad (2.2)$$

Тогда в силу соотношения (1.35) волновая функция в произвольный последующий момент времени запишется в виде

$$\Psi(t) = U(t, -\infty) \Psi(-\infty) = U(t, -\infty) \Phi_i. \quad (2.3)$$

После столкновения в момент $t = +\infty$ наши частицы удалятся далеко друг от друга и перейдут в состояние, описываемое волновой функцией

$$\Psi(+\infty) = U(+\infty, -\infty) \Phi_i. \quad (2.4)$$

В данной главе мы рассмотрим только тот случай, когда состояния частиц при $t = +\infty$ определяются

собственными функциями того же самого свободного гамильтониана. То есть будем считать, что картина аналогична упругому рассеянию протона на нейтроне: разбиение (1.13) гамильтониана на два слагаемых после столкновения такое же, как и до столкновения. Случай, когда свободный гамильтониан после столкновения отличается от свободного гамильтониана до столкновения, мы рассмотрим в гл. 5. Разложив волновую функцию $\Psi(+\infty)$ (2.4) по полной системе собственных функций $\{\Phi_i\}$ гамильтониана H_0 и обозначив коэффициенты разложения символами $S_{i,j}$, представим ее в виде суперпозиции собственных функций Φ_j :

$$\Psi(+\infty) = U(+\infty, -\infty) \Phi_i = \sum_j S_{j,i} \Phi_j. \quad (2.5)$$

Амплитуда вероятности того, что в состоянии $\Psi(+\infty)$ можно найти состояние, описываемое собственной функцией Φ_f гамильтониана H_0 , такого, что

$$H_0 \Phi_f = E_f \Phi_f, \quad (2.6)$$

дается выражением

$$\begin{aligned} \langle \Phi_f | \Psi(+\infty) \rangle &= \langle \Phi_f | U(+\infty, -\infty) | \Phi_i \rangle = \\ &= \sum_j S_{j,i} \langle \Phi_f | \Phi_j \rangle = \sum_j S_{j,i} \delta_{f,j} = S_{f,i}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

при выводе которого использовано условие ортогональности (2.2). Иными словами, матричный элемент

$$S_{f,i} = \langle \Phi_f | U(+\infty, -\infty) | \Phi_i \rangle \quad (2.8)$$

дает амплитуду вероятности того, что система, находящаяся в момент $t = -\infty$ в собственном состоянии Φ_i гамильтониана H_0 , под влиянием взаимодействия $V(t)$ перейдет в момент $t = +\infty$ в собственное состояние Φ_f того же гамильтониана H_0 . Совокупность этих матричных элементов называют S-матрицей или матрицей рассеяния, а оператор

$$S \equiv U(+\infty, -\infty) \quad (2.9)$$

называют S-оператором. Матрица (2.8) дает вероятности перехода из состояния Φ_i в состояние Φ_f , зная

которые, можно определить сечение рассеяния. Следовательно, S -матрица — важнейшая физическая величина, играющая в нестационарной теории рассеяния центральную роль. В данном параграфе мы займемся изучением свойств S -матрицы, укажем методы ее определения и в заключение покажем, как с ее помощью получить результаты, совпадающие с результатами стационарной теории рассеяния.

А. Предельные операции

Выше мы исходили из предположения, что взаимодействие отсутствует при $t = \pm \infty$. Но волновые функции двух частиц (например, протона и нейтрона), определенные как собственные состояния гамильтониана H_0 (плоские волны), отличны от нуля во всем пространстве. Следовательно, они накладываются друг на друга при $t = \pm \infty$, т. е. между частицами, вопреки предположению, есть взаимодействие. Иными словами, два утверждения: 1) начальное и конечное состояния суть собственные состояния гамильтониана H_0 и 2) между частицами при $t = \pm \infty$ нет взаимодействия — противоречат друг другу. На математическом языке это означает, что при действии оператора $U(t, t')$ [формула (1.36)] на собственные состояния гамильтониана H_0 получаются величины, предел которых при $t \rightarrow +\infty$, $t' \rightarrow -\infty$ не существует. В самом деле, при действии оператора (1.36) на собственную функцию Φ_i гамильтониана H_0 появляется множитель $\exp(-iE_i t'/\hbar)$, который, очевидно, неограниченно осциллирует при $t' \rightarrow -\infty$. Но с физической точки зрения состояние частицы, падающей из прямоугольного отверстия, вовсе не должно быть строго плоской волной, т. е. чистым собственным состоянием оператора H_0 . Физически в начальном состоянии мы имеем два перекрывающихся волновых пакета, центры которых достаточно удалены друг от друга. Такова же ситуация и в конечном состоянии. О взаимодействии же можно говорить только в том случае, когда волновые пакеты перекрываются. Таким образом, чтобы обойти указанную трудность, при построении теории нужно

задавать начальное и конечное состояние не с помощью точных собственных функций оператора H_0 , как сделано в формулах (2.1) и (2.6), а в виде волновых пакетов (суперпозиций этих собственных функций) и следить за движением волновых пакетов во времени.

Построить теорию с использованием волновых пакетов, разумеется, можно¹⁾, но все вычисления тогда становятся чудовищно сложными. Поэтому предложен другой способ преодоления указанной трудности: вместо того, чтобы задавать начальное и конечное состояния с помощью строгих собственных функций оператора H_0 , можно принять, что при $t = \pm \infty$ гамильтониан взаимодействия $V(t)$ обращается в нуль. Такую операцию называют *выключением взаимодействия*. Но если ее провести в некоторый определенный момент времени $\pm T_0$, то в силу соотношения неопределенностей $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ энергии системы будет придана большая неопределенность. Если в стационарной теории рассеяния рассматривать энергию E_k (входящую в волновую функцию $\psi_k^{(+)}$) как энергию падающей частицы, то момент выключения взаимодействия лучше сделать максимально неопределенным. Тогда при $\Delta t \rightarrow \infty$ неопределенность энергии ΔE будет стремиться к нулю. Такую операцию выключения взаимодействия называют *адиабатическим выключением взаимодействия*. Термин «адиабатическое выключение» означает, что выключение производят достаточно медленно, чтобы не портить состояние. Поэтому вместо термина «адиабатическое выключение» уместнее был бы термин «*квазистатическое выключение*» взаимодействия. Но термин «адиабатическое выключение» общепринят, и мы будем им пользоваться. Самый прямой способ адиабатического выключения — заменить гамильтониан взаимодействия $V(t)$ в правой части уравнения (1.16) величиной $\exp(-\varepsilon |t|/\hbar) V(t)$. Тогда

¹⁾ О систематическом использовании метода волновых пакетов см. монографию М. Гольдбергера, К. Ватсона «Теория столкновений», «Мир», 1967. — *Прим. ред.*

это уравнение примет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) V(t) \Psi(t), \quad (2.10)$$

где ε — бесконечно малый положительный параметр. После завершения всех вычислений нужно перейти к пределу при $\varepsilon = 0$. Интегральное уравнение для оператора $U(t, -\infty)$, определенного равенством

$$\Psi(t) = U(t, -\infty) \Phi_t, \quad (2.11)$$

принимает вид

$$U(t, -\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) V(t') U(t', -\infty). \quad (2.12)$$

Оператор $U(t, -\infty)$ в формулах (2.11) и (2.12) — это предел оператора $U(t, t')$ [формула (1.40)] при $t' \rightarrow -\infty$. Но для целей последующего изложения очень неудобно определять $U(t, -\infty)$ как решение интегрального уравнения (2.12), поскольку при точном решении этого уравнения изменяется первоначальный смысл оператора $U(t, -\infty)$. Кроме того, решить уравнение (2.12) практически можно лишь в случае, когда решение представляется рядом (1.45), который по существу не отличается от ряда, получаемого последовательным применением борновского приближения. Во многих случаях сходимость этого ряда не гарантирована.

Чтобы устранить недостатки операции выключения взаимодействия (2.10), в данной книге операторы $U(t, \mp\infty)$ при $t' = \pm\infty$ определим формулами

$$U(t, \mp\infty) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{\pm\infty}^t dt' U(t, t') \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) V(t'), \quad (2.13)$$

$$U(\pm\infty, t) \equiv 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{\pm\infty}^t dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) V(t') U(t', t), \quad (2.14)$$

которые получаются из формул (1.47) и (1.40), если в них принять пределы интегрирования равными соот-

ответственно $t' = \mp\infty$, $t = \pm\infty$ и ввести под интеграл множитель $\exp(-\varepsilon|t|/\hbar)$, обеспечивающий сходимость. При таком определении в отличие от определения (2.12) величина $U(t, t')$ в правой части равенства определяется соотношением (1.36) и смысл операторов $U(t, \mp\infty)$ не изменяется при взятии интегралов в правых частях равенств (2.13) и (2.14). Иными словами, определения (2.13), (2.14) понятнее определения (2.10). Их удобство более ясно проявится в гл. 5 при изложении теории рассеяния в системе трех тел.

Из определений (2.13) и (2.14) непосредственно вытекают следующие свойства:

$$\begin{aligned} U^\dagger(t, \pm\infty) &= U(\pm\infty, t), \\ U^\dagger(\pm\infty, t) &= U(t, \pm\infty). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Далее, в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ выполняются соотношения

$$\begin{aligned} U(t, \pm\infty) &= U(t, t')U(t', \pm\infty), \\ U(\pm\infty, t) &= U(\pm\infty, t')U(t', t), \end{aligned} \quad (2.16)$$

что можно доказать следующим образом:

$$\begin{aligned} &U(t, t')U(t', \pm\infty) = \\ &= U(t, t') \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{\pm\infty}^{t'} dt'' U(t', t'') \exp(-\varepsilon|t''|/\hbar) V(t'') \right] = \\ &= U(t, t') - \frac{i}{\hbar} \int_{\pm\infty}^{t'} dt'' U(t, t'') \exp(-\varepsilon|t''|/\hbar) V(t'') = \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt'' U(t, t'') \exp(-\varepsilon|t''|/\hbar) V(t'') - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{\pm\infty}^{t'} dt'' U(t, t'') \exp(-\varepsilon|t''|/\hbar) V(t'') = \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{\pm\infty}^t dt'' U(t, t'') \exp(-\varepsilon|t''|/\hbar) V(t'') = \\ &= U(t, \pm\infty). \end{aligned}$$

При доказательстве второго из трех равенств нужно воспользоваться свойствами (1.37), а третьего — уравнением (1.47) и учесть, что в интегралах с конечными пределами интегрирования безразлично, добавлять или нет обрезывающий множитель в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Б. Волновые функции

Определим волновые функции $\Psi_i^{(\pm)}$:

$$\Psi_i^{(\pm)} \equiv U(0, \mp \infty) \Phi_i. \quad (2.17)$$

Подставив сюда выражение (2.13), получим

$$\Psi_i^{(\pm)} = \Phi_i + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\mp \infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) U(0, t') V(t') \Phi_i. \quad (2.18)$$

На основании определения (1.17) и формулы (1.36), переписав все операторы в представлении Шредингера, приведем последнее уравнение к виду

$$\begin{aligned} \Psi_i^{(\pm)} &= \Phi_i + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\mp \infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) \exp(iHt'/\hbar) \times \\ &\quad \times \exp(-iH_0 t'/\hbar) \exp(iH_0 t'/\hbar) V \exp(-iH_0 t'/\hbar) \Phi_i = \\ &= \Phi_i + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\mp \infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) \exp(iHt'/\hbar) V \times \\ &\quad \times \exp(-iE_i t'/\hbar) \Phi_i = \\ &= \Phi_i + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\mp \infty} dt' \exp\{-i(E_i - H)t'/\hbar - \varepsilon |t'|/\hbar\} V \Phi_i = \\ &= \Phi_i + \frac{1}{E_i - H \pm i\varepsilon} V \Phi_i. \end{aligned} \quad (2.19)$$

В силу формулы (2.28) из гл. 2 выполняется соотношение

$$\frac{1}{E_i - H \pm i\varepsilon} = \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\varepsilon} \left[1 + V \frac{1}{E_i - H \pm i\varepsilon} \right], \quad (2.20)$$

с учетом которого из выражения (2.19) находим, что

$$\begin{aligned}\Psi_i^{(\pm)} &= \Phi_i + \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\epsilon} \left[1 + V \frac{1}{E_i - H \pm i\epsilon} \right] V \Phi_i = \\ &= \Phi_i + \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\epsilon} V \left[1 + \frac{1}{E_i - H \pm i\epsilon} V \right] \Phi_i = \\ &= \Phi_i + \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\epsilon} V \Psi_i^{(\pm)},\end{aligned}\quad (2.21)$$

т. е. волновая функция (2.17) удовлетворяет интегральному уравнению

$$\Psi_i^{(\pm)} = \Phi_i + \frac{1}{E_i - H_0 \pm i\epsilon} V \Psi_i^{(\pm)}, \quad (2.22)$$

формальное решение которого таково:

$$\Psi_i^{(\pm)} = \Phi_i + \frac{1}{E_i - H \pm i\epsilon} V \Phi_i. \quad (2.23)$$

Очевидно, что этот результат по форме совпадает с выражениями (2.27) и (2.34) из гл. 2. В самом деле, уравнение (2.22) не что иное, как уравнение Липпмана — Швингера [формула (2.27) из гл. 2], а $\Psi_i^{(\pm)}$ — волновая функция стационарной задачи рассеяния при условии, что волновая функция падающей частицы есть Φ_i . Таким образом, в нестационарной теории рассеяния мы вывели интегральное уравнение рассеяния, полностью совпадающее с соответствующим уравнением гл. 2. Но в уравнении (2.24) из гл. 2 оператор H_0 — гамильтониан относительного движения свободных частиц, а V — потенциал их взаимодействия, тогда как свободный гамильтониан H_0 и гамильтониан взаимодействия V , входящие в формулу (2.22), могут быть и более сложными операторами. Следовательно, уравнение Липпмана — Швингера (2.22), выведенное здесь, — более общее, чем в гл. 2, интегральное уравнение рассеяния.

Подытоживая, можно сказать следующее. Волновая функция Φ_i состояния, задаваемого в момент $t = \mp \infty$ уравнением

$$H_0 \Phi_i = E_i \Phi_i, \quad (2.24)$$

под действием оператора $U(0, \mp \infty)$ постепенно «вбирает» в себя эффект взаимодействия и к моменту

$t = 0$ развивается в волновую функцию $\Psi_i^{(\pm)}$ собственного состояния полного гамильтониана H с собственным значением энергии E_i , равным начальному значению энергии, т. е. состояния $\Psi_i^{(\pm)}$, удовлетворяющего уравнению

$$H\Psi_i^{(\pm)} = E_i\Psi_i^{(\pm)}. \quad (2.25)$$

Сформулированное положение называют *адиабатической теоремой*. Оператор, переводящий начальное состояние Φ_i в состояние $\Psi_i^{(\pm)}$, т. е. оператор $U(0, \mp \infty)$, называют *волновым оператором Мёллера*¹⁾.

Из формул (2.17), (2.24) и (2.25) вытекает соотношение

$$\begin{aligned} HU(0, \mp \infty)\Phi_i &= E_iU(0, \mp \infty)\Phi_i = \\ &= U(0, \mp \infty)E_i\Phi_i = U(0, \mp \infty)H_0\Phi_i. \end{aligned}$$

Поскольку оно справедливо для произвольной функции Φ_i , принадлежащей полному набору $\{\Phi_n\}$ собственных функций оператора H_0 , имеет место операторное соотношение

$$HU(0, \mp \infty) = U(0, \mp \infty)H_0. \quad (2.26)$$

В. Ортогональность и нормировка волновых функций и волновой оператор

В гл. 2 падающую плоскую волну мы определяли формулой

$$\phi_k = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(ik \cdot \mathbf{r}).$$

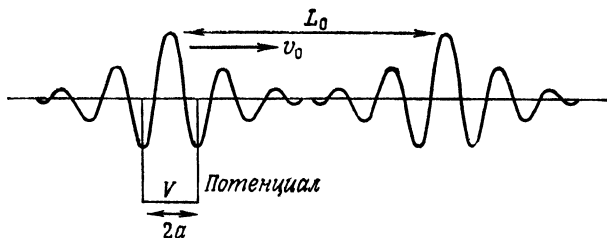
Эта волна нормируется в соответствии с условием

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}\} d^3\mathbf{r} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (2.27)$$

которое можно истолковать как требование, чтобы на каждую клетку объемом $(2\pi)^3$ приходилась одна час-

¹⁾ Соответствующую матрицу называют иногда «половинной S-матрицей». — Прим. ред.

тица [такое толкование мы давали уже в формуле (2.7) из гл. 2]. По аналогии с нормировкой (2.27) нетрудно сообразить, что волновую функцию $\Psi_i^{(\pm)}$ нужно нормировать следующим образом. Рассмотрим



Фиг. 30. Соотношение между размером волнового пакета и параметром выключения взаимодействия.

большой куб с ребром L и в нем одну частицу. Соответствующая функция Φ_i будет иметь вид

$$\Phi_{\mathbf{k}}^{(L)} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (2.28)$$

На границах куба потребуем выполнения периодических граничных условий. Тогда придем к следующему условию нормировки начального состояния:

$$\langle \Phi_{\mathbf{k}}^{(L)} | \Phi_{\mathbf{k}'}^{(L)} \rangle = \frac{1}{L^3} \int_{L^3} \exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}\} d^3\mathbf{r} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad (2.29)$$

где каждое из k_x , k_y , k_z пробегает значения $2\pi n/L$ ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Такой выбор нормировки обусловлен тем, что волновая функция $\Psi_i^{(\pm)}$ зависит от бесконечно малого параметра ϵ , связанного с длиной ребра введенного выше куба. Обрезающий фактор введен нами в качестве замены волнового пакета, чтобы сделать падающую волну неплоской. В качестве простой иллюстрации рассмотрим рассеяние частицы в случае потенциала, показанного на фиг. 30. Пусть a — радиус области, в которой потенциал отличен от нуля. Волновой пакет

Φ_i , занимающий область, объем которой равен приблизительно L^3 , можно представить в виде

$$\bar{\Phi}_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(-\sqrt[3]{\pi} |\mathbf{r}|/L) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (2.30)$$

Этот пакет нормирован в соответствии с условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{\Phi}_i^*(\mathbf{r}) \bar{\Phi}_i(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = 1. \quad (2.31)$$

Если $L \gg a$, то область, в которой потенциал отличен от нуля, очень мала по сравнению с областью, занимаемой волновым пакетом. При $t = 0$ волновой пакет перекрывает область ненулевого потенциала и потенциал на него действует. Из фиг. 30 ясно, что волновой пакет уйдет из области ненулевого потенциала за время, равное приблизительно L/v_0 , где v_0 — групповая скорость пакета. Тогда волна уже не будет взаимодействовать с потенциалом, откуда следует, что время \hbar/ε , за которое выключается потенциал, должно по порядку величины совпадать с L/v_0 . Иначе говоря, параметр L , описывающий переход волнового пакета (2.30) в плоскую волну (предельный переход при $L \rightarrow \infty$), должен быть связан с параметром ε , описывающим выключение потенциала (предельный переход при $\varepsilon \rightarrow 0$), соотношением

$$\varepsilon \approx \frac{\hbar v_0}{L}. \quad (2.32)$$

Основываясь на этих предварительных соображениях, рассмотрим условия ортогональности и нормировки волновых функций $\Psi_i^{(\pm)}$. Волновая функция $\Psi_i^{(\pm)}$ — амплитуда вероятности. Ввиду этого из условий ортогональности и нормировки начальных волновых функций

$$\langle \Phi_i^{(L)} | \Phi_j^{(L)} \rangle = \delta_{i,j} \quad (2.33)$$

вытекает, что в пределе при $L \rightarrow \infty$ функции $\Psi_i^{(\pm)}$ должны быть ортонормированы в соответствии с условием

$$\langle \Psi_i^{(\pm)} | \Psi_j^{(\pm)} \rangle = \delta_{i,j}. \quad (2.34)$$

Чтобы проверить, выполняется ли условие (2.34), преобразуем сначала формулу (2.23)

$$\begin{aligned}\Psi_i^{(\pm)} &= \left(1 + \frac{1}{E_i - H \pm i\epsilon} V\right) \Phi_i^{(L)} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_i - H \pm i\epsilon} (H - H_0)\right] \Phi_i^{(L)} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_i - H \pm i\epsilon} (H - E_i)\right] \Phi_i^{(L)} = \frac{\pm i\epsilon}{E_i - H \pm i\epsilon} \Phi_i^{(L)}.\end{aligned}\quad (2.35)$$

С учетом этого результата получаем

$$\begin{aligned}\langle \Psi_i^{(+)} | \Psi_j^{(+)} \rangle &= \langle \Phi_i^{(L)} | \frac{-i\epsilon}{E_i - H - i\epsilon} \frac{i\epsilon}{E_j - H + i\epsilon} | \Phi_j^{(L)} \rangle = \\ &= \frac{i\epsilon}{E_j - E_i + 2i\epsilon} \langle \Phi_i^{(L)} | \frac{-i\epsilon}{E_i - H - i\epsilon} + \frac{i\epsilon}{E_j - H + i\epsilon} | \Phi_j^{(L)} \rangle = \\ &= \frac{i\epsilon}{E_j - E_i + 2i\epsilon} [\langle \Psi_i^{(+)} | \Phi_j^{(L)} \rangle + \langle \Phi_i^{(L)} | \Psi_j^{(+)} \rangle].\end{aligned}\quad (2.36)$$

Далее, с помощью уравнения Липпмана — Швингера (2.22) находим

$$\begin{aligned}\langle \Phi_i^{(L)} | \Psi_j^{(+)} \rangle &= \langle \Phi_i^{(L)} | \Phi_j^{(L)} \rangle + \langle \Phi_i^{(L)} | \frac{1}{E_j - H_0 + i\epsilon} V | \Psi_j^{(+)} \rangle = \\ &= \delta_{i,j} + \frac{1}{E_j - E_i + i\epsilon} \langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_j^{(+)} \rangle.\end{aligned}\quad (2.37)$$

Точно так же получаем

$$\langle \Psi_i^{(+)} | \Phi_j^{(L)} \rangle = \delta_{i,j} + \frac{1}{E_i - E_j - i\epsilon} \langle \Psi_i^{(+)} | V | \Phi_j^{(L)} \rangle.\quad (2.38)$$

Подставляя (2.37) и (2.38) в (2.36), приходим к формуле

$$\begin{aligned}\langle \Psi_i^{(+)} | \Psi_j^{(+)} \rangle &= \\ &= \frac{i\epsilon}{E_j - E_i + 2i\epsilon} \left[2\delta_{i,j} + \frac{1}{E_j - E_i + i\epsilon} \{ \langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_j^{(+)} \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \langle \Psi_i^{(+)} | V | \Phi_j^{(L)} \rangle \} \right],\end{aligned}\quad (2.39)$$

которую с учетом соотношения

$$\begin{aligned}\langle \Phi_j^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)*} \rangle &= \langle \Phi_j^{(L)} | V U(0, -\infty) | \Phi_i^{(L)*} \rangle = \\ &= \langle \Phi_i^{(L)} | U^\dagger(0, -\infty) V | \Phi_j^{(L)} \rangle = \\ &= \langle U(0, -\infty) \Phi_i^{(L)} | V | \Phi_j^{(L)} \rangle = \langle \Psi_i^{(+)} | V | \Phi_j^{(L)} \rangle\end{aligned}\quad (2.40)$$

можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle \Psi_i^{(+)} | \Psi_j^{(+)} \rangle &= \\ &= \frac{2i\varepsilon}{E_j - E_i + 2i\varepsilon} \left[\delta_{i,j} + \frac{1}{2} \frac{1}{E_j - E_i + i\varepsilon} \{ \langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_j^{(+)} \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \langle \Phi_j^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)*} \rangle \} \right]. \quad (2.41) \end{aligned}$$

Рассмотрим матричный элемент $\langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_j^{(+)} \rangle$. При интегрировании по области L^3 нужно учитывать, что он отличен от нуля только там, где есть взаимодействие, т. е. в области размером порядка a^3 , ввиду чего справедливо приближенное выражение

$$\langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_j^{(+)} \rangle \sim \frac{V_0 a^3}{L^3}, \quad (2.42)$$

где V_0 — максимальное значение потенциала V , а величина L^3 в знаменателе связана с параметром нормировки (2.28). Аналогичное выражение справедливо и для $\langle \Phi_j^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)*} \rangle$. Поэтому формулу (2.41) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle \Psi_i^{(+)} | \Phi_j^{(+)} \rangle &= \\ &= \frac{2i\varepsilon}{E_j - E_i + 2i\varepsilon} \left[\delta_{i,j} + \frac{1}{2} \frac{1}{E_j - E_i + i\varepsilon} \frac{V_0 a^3}{L^3} \right]. \quad (2.43) \end{aligned}$$

Если $E_i \neq E_j$, то величина (2.43) в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ обращается в нуль. Если же $E_i = E_j$, то с учетом соотношения (2.32) получаем

$$\langle \Psi_i^{(+)} | \Psi_j^{(+)} \rangle = \delta_{i,j} + \frac{1}{2i} \frac{V_0 a^3}{\varepsilon L^3} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \delta_{i,j}. \quad (2.44)$$

Тем самым доказано, что условие ортогональности и нормировки (2.34) действительно выполняется. Аналогичным образом можно показать справедливость таких же условий ортогональности и нормировки и для волновой функции $\Psi_i^{(-)}$, описывающей рассеяние со сходящейся волной.

Из условий ортонормированности волновых функций $\Psi_i^{(\pm)}$ можно вывести ряд свойств волнового оператора $U(0, \mp \infty)$. На основании определения (2.17)

и условия полноты

$$\sum_i |\Phi_i^{(L)}\rangle \langle \Phi_i^{(L)}| = 1 \quad (2.45)$$

получим

$$\sum_i |\Psi_i^{(\pm)}\rangle \langle \Phi_i^{(L)}| = \sum_i U(0, \mp \infty) |\Phi_i^{(L)}\rangle \langle \Phi_i^{(L)}| = U(0, \mp \infty),$$

т. е.

$$U(0, \mp \infty) = \sum_i |\Psi_i^{(\pm)}\rangle \langle \Phi_i^{(L)}|. \quad (2.46)$$

Из формул (2.15) можно вывести, что

$$U(\mp \infty, 0) = U^\dagger(0, \mp \infty) = \sum_i |\Phi_i^{(L)}\rangle \langle \Psi_i^{(\pm)}|. \quad (2.47)$$

Следовательно, выполняется соотношение

$$\begin{aligned} U^\dagger(0, \mp \infty) U(0, \mp \infty) &= U(\mp \infty, 0) U(0, \mp \infty) = \\ &= \sum_{i,j} |\Phi_i^{(L)}\rangle \langle \Psi_i^{(\pm)} | \Psi_j^{(\pm)} \rangle \langle \Phi_j^{(L)}| = \sum_i |\Phi_i^{(L)}\rangle \langle \Phi_i^{(L)}| = 1, \end{aligned} \quad (2.48)$$

при выводе которого нужно воспользоваться формулами (2.43) и (2.45). Из соотношения (2.48) вытекает, что

$$U(\mp \infty, 0) U(0, \mp \infty) \Phi_i^{(L)} = \Phi_i^{(L)}.$$

Далее, так как

$$U(\mp \infty, 0) U(0, \mp \infty) \Phi_i^{(L)} = U(\mp \infty, 0) \Psi_i^{(\pm)},$$

мы имеем

$$U(\mp \infty, 0) \Psi_i^{(\pm)} = \Phi_i^{(L)}. \quad (2.49)$$

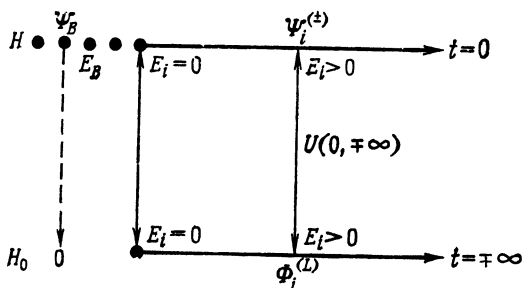
Значит, при действии на волновую функцию $\Psi_i^{(\pm)}$ оператором $U(\mp \infty, 0)$ мы возвращаемся к моменту времени $t = \mp \infty$ и к состоянию $\Phi_i^{(L)}$. Изменим теперь порядок действия операторов в формуле (2.48). Получим соотношение

$$\begin{aligned} U(0, \mp \infty) U^\dagger(0, \mp \infty) &= U(0, \mp \infty) U(\mp \infty, 0) = \\ &= \sum_{i,j} |\Psi_i^{(\pm)}\rangle \langle \Phi_i^{(L)} | \Phi_j^{(L)} \rangle \langle \Psi_j^{(\pm)}| = \sum_i |\Psi_i^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_i^{(\pm)}| = \\ &= 1 - \sum_B |\Psi_B\rangle \langle \Psi_B|, \end{aligned} \quad (2.50)$$

в котором Ψ_B — волновые функции связанных состояний, принадлежащие полной системе $\{\Psi_i^{(\pm)}, \Psi_B\}$ собственных функций полного гамильтониана H :

$$H\Psi_B = E_B\Psi_B, \quad E_B < 0. \quad (2.51)$$

Итак, если полный гамильтониан допускает существование связанных состояний, то произведение (2.48)



Фиг. 31. Свойства волнового оператора.

равно единице, а произведение (2.50) (с обратной последовательностью операторов) единице не равно. Это значит, что при наличии связанных состояний волновой оператор $U(0, \mp\infty)$ не унитарен.

А каков результат действия волнового оператора $U(\pm\infty, 0)$ на волновые функции связанных состояний? На основании определения (2.14) получаем

$$\begin{aligned} U(\pm\infty, 0)\Psi_B &= \\ &= \Psi_B - \frac{i}{\hbar} \int_0^{\pm\infty} dt' \exp(-\varepsilon|t'|/\hbar) \exp\{i(H_0 - E_B)t'/\hbar\} V\Psi_B = \\ &= \Psi_B + \frac{1}{H_0 - E_B \mp i\varepsilon} V\Psi_B = \\ &= \Psi_B + \frac{1}{H_0 - E_B \mp i\varepsilon} (E_B - H_0)\Psi_B = \Psi_B - \Psi_B = 0. \quad (2.52) \end{aligned}$$

Собственные значения E_i оператора H_0 обычно положительны, а значения E_B — отрицательны. Поэтому

энергетические знаменатели в формуле (2.52) не имеют особых точек и можно принять $\epsilon = 0$. Из результата (2.52) вытекает, что связанные состояния ортогональны состояниям рассеяния¹⁾, так как

$$\begin{aligned} \langle \Psi_B | \Psi_i^{(\pm)} \rangle &= \langle \Psi_B | U(0, \mp \infty) | \Phi_i^{(L)} \rangle = \\ &= \langle U(\mp \infty, 0) \Psi_B | \Phi_i^{(L)} \rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Подытоживая, свойства волнового оператора можно представить диаграммой, показанной на фиг. 31. Горизонтальная линия и точки в верхней части диаграммы изображают спектр собственных значений полного гамильтониана H при $t = 0$ и соответствующие собственные состояния. Горизонтальной линией в нижней части диаграммы показан спектр собственных значений и соответствующие собственные состояния свободного гамильтониана H_0 при $t = \mp \infty$. Состояние рассеяния и начальное (или конечное) состояние могут быть связаны волновым оператором, причем, согласно адиабатической теореме, собственные значения энергии сохраняют одно и то же значение. При действии же на связанные состояния полного гамильтониана волновой оператор дает нуль. Это значит, что с помощью волнового оператора нельзя вывести связанные состояния из собственных состояний свободного гамильтониана.

¹⁾ В отечественной литературе термин «состояние рассеяния» не принят. В частном случае системы двух тел вместо «состояния рассеяния» иногда говорят о состояниях непрерывного спектра. Но термин «состояние непрерывного спектра», понимаемый как «состояние, зависящее только от непрерывных квантовых чисел», более узок, чем термин «состояние рассеяния», так как в случае, когда в рассеянии участвует не менее трех тел, «состояние рассеяния» может содержать связанные состояния подсистемы полной системы частиц (т. е. наряду с непрерывными зависеть также и от дискретных квантовых чисел). В то же время термин «состояние рассеяния» отличается и от термина «конечное состояние», так как в конечном состоянии, в частности, может образоваться связанное состояние полной системы частиц. Можно сказать, что термин «состояние рассеяния» является антонимом термина «связанное состояние полной системы частиц». — *Прим. перев.*

Г. S-матрица и ее свойства

Если рассеяние рассматривать как переходы между состояниями, то для определения вероятности таких переходов нужно вычислить оператор S [формула (2.9)]. Поскольку аргументы оператора $S = U(+\infty, -\infty)$ бесконечно велики, необходимо определить предельный переход $t \rightarrow \pm\infty$. Определим оператор $U(\pm\infty, \mp\infty)$, положив в формуле (2.14) $t = \mp\infty$:

$$\begin{aligned} U(\pm\infty, \mp\infty) &\equiv \\ &\equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{\mp\infty}^{\pm\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) V(t') U(t', \mp\infty). \end{aligned} \quad (2.54)$$

Оператор $U(t', \mp\infty)$, стоящий под знаком интеграла, дается формулой (2.13). Но оператор S можно также получить, положив $t = \pm\infty$ в формуле (2.13):

$$\begin{aligned} U'(\pm\infty, \mp\infty) &\equiv \\ &\equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{\mp\infty}^{\pm\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) U(\pm\infty, t') V(t'). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Здесь величина $U(\pm\infty, t')$ дается формулой (2.14). Совпадают ли эти два выражения? Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим $U(+\infty, -\infty)$. Подставляя в формулу (2.55) выражение (2.14), получаем

$$\begin{aligned} U'(+\infty, -\infty) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) \times \\ &\times \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{\infty} dt'' \exp(-\varepsilon |t''|/\hbar) V(t'') U(t'', t') \right] V(t') = \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) V(t') + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) \times \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \theta(t'' - t') \exp(-\varepsilon' |t''| \sqrt{\hbar}) V(t'') U(t'', t') V(t') = \\
& = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) V(t') + \\
& + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \exp(-\varepsilon' |t''| \sqrt{\hbar}) \times \\
& \times \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t' - t'') \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) V(t') U(t', t'') V(t'') = \\
& = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) V(t') \times \\
& \times \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp(-\varepsilon' |t''| \sqrt{\hbar}) U(t', t'') V(t'') \right] = \\
& = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) V(t') U(t', -\infty) = \\
& = U(+\infty, -\infty). \quad (2.56)
\end{aligned}$$

Таким образом, величина $U(+\infty, -\infty)$, даваемая формулой (2.54), совпадает с величиной $U'(+\infty, -\infty)$, даваемой формулой (2.55). Точно так же можно показать, что

$$U'(-\infty, +\infty) = U(-\infty, +\infty). \quad (2.57)$$

При доказательстве (2.56) во втором равенстве надо применить ступенчатую функцию (1.42), а в третьем равенстве поменять местами ε и ε' и переобозначить

переменные интегрирования t' и t'' . Далее, из выражений (2.54) и (2.55) вытекает равенство

$$U(-\infty, +\infty) = U^\dagger(+\infty, -\infty). \quad (2.58)$$

Но, с другой стороны, исходя из формул (2.13) и (2.14), оператор $U(+\infty, -\infty)$ можно также определить как произведение:

$$U''(+\infty, -\infty) \equiv U(\infty, t)U(t, -\infty). \quad (2.59)$$

Не будет ли это новое определение противоречить определениям (2.54) и (2.55)? Оказывается, нет, так как из определения (2.54) и соотношений (2.16) вытекает, что

$$\begin{aligned} U(+\infty, -\infty) &= \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) V(t') U(t', 0) U(0, -\infty) = \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \left[\int_0^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) V(t') U(t', 0) + \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^0 dt' \exp(-\varepsilon |t'| \sqrt{\hbar}) V(t') U(t', 0) \right] U(0, -\infty) = \\ &= 1 + \{U(+\infty, 0) - 1\} U(0, -\infty) - \\ &\quad - \{U(-\infty, 0) - 1\} U(0, -\infty) = \\ &= 1 + U(+\infty, 0)U(0, -\infty) - U(-\infty, 0)U(0, -\infty) = \\ &= U(+\infty, 0)U(0, -\infty) = U''(+\infty, -\infty). \quad (2.60) \end{aligned}$$

Для доказательства третьего из равенств (2.60) надо использовать формулу (2.14), а пятого — формулу (2.48).

Исходя из указанных определений S -оператора, найдем элементы S -матрицы, рассматривая S -оператор как оператор в представлении Шредингера. Обозначив начальное состояние символом $\Phi_i^{(L)}$, а конеч-

ное — символом $\Phi_f^{(L)}$, вычислим матричный элемент перехода между ними:

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_f^{(L)} | S | \Phi_i^{(L)} \rangle &= \langle \Phi_f^{(L)} | U(+\infty, -\infty) | \Phi_i^{(L)} \rangle = \\
 &= \langle \Phi_f^{(L)} | \Phi_i^{(L)} \rangle - \\
 &- \frac{i}{\hbar} \langle \Phi_f^{(L)} | \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) V(t') U(t', -\infty) | \Phi_i^{(L)} \rangle = \\
 &= \delta_{f,i} - \frac{i}{\hbar} \langle \Phi_f^{(L)} | \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) \times \\
 &\quad \times V(t') U(t', 0) | U(0, -\infty) \Phi_i^{(L)} \rangle = \\
 &= \delta_{f,i} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) \exp(iE_f t'/\hbar) \times \\
 &\quad \times \langle \Phi_f^{(L)} | V \exp(-iHt') | \Psi_i^{(+)} \rangle = \\
 &= \delta_{f,i} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp(-\varepsilon |t'|/\hbar) \times \\
 &\quad \times \exp\{i(E_f - E_i)t'/\hbar\} \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \\
 &= \delta_{f,i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle. \tag{2.61}
 \end{aligned}$$

Вскоре станет ясно, что именно такое представление элементов S-матрицы играет наиболее важную роль в нестационарной теории рассеяния, поскольку с их помощью можно рассчитать сечение рассеяния. Но, прежде чем переходить к этой задаче, исследуем свойства определенного здесь S-оператора.

Перепишем S-матрицу в виде

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_a^{(L)} | S | \Phi_b^{(L)} \rangle &= \langle \Phi_a^{(L)} | U(+\infty, -\infty) | \Phi_b^{(L)} \rangle = \\
 &= \langle \Phi_a^{(L)} | U(+\infty, 0) U(0, -\infty) | \Phi_b^{(L)} \rangle = \\
 &= \langle U^\dagger(+\infty, 0) \Phi_a^{(L)} | U(0, -\infty) \Phi_b^{(L)} \rangle = \\
 &= \langle U(0, +\infty) \Phi_a^{(L)} | U(0, -\infty) \Phi_b^{(L)} \rangle = \\
 &= \langle \Psi_a^{(-)} | \Psi_b^{(+)} \rangle. \tag{2.62}
 \end{aligned}$$

Аналогично,

$$\begin{aligned} \langle \Phi_a^{(L)} | S^\dagger | \Phi_b^{(L)} \rangle &= \langle \Phi_a^{(L)} | U^\dagger(+\infty, -\infty) | \Phi_b^{(L)} \rangle = \\ &= \langle \Phi_a^{(L)} | U(-\infty, +\infty) | \Phi_b^{(L)} \rangle = \\ &= \langle \Psi_a^{(+)} | \Psi_b^{(-)} \rangle. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \sum_c \langle \Phi_a^{(L)} | S^\dagger | \Phi_c^{(L)} \rangle \langle \Phi_c^{(L)} | S | \Phi_b^{(L)} \rangle &= \\ &= \sum_c \langle \Psi_a^{(+)} | \Psi_c^{(-)} \rangle \langle \Psi_c^{(-)} | \Psi_b^{(+)} \rangle = \\ &= \langle \Psi_a^{(+)} | \Psi_b^{(+)} \rangle - \sum_B \langle \Psi_a^{(+)} | \Psi_B \rangle \langle \Psi_B | \Psi_b^{(+)} \rangle = \delta_{a, b}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Здесь использовано соотношение полноты собственных функций гамильтониана всей системы

$$\sum_c | \Psi_c^{(-)} \rangle \langle \Psi_c^{(-)} | + \sum_B | \Psi_B \rangle \langle \Psi_B | = 1 \quad (2.65)$$

и равенства (2.34) и (2.53). Волновые функции Ψ_B в формуле (2.65) принадлежат связанным состояниям оператора H . Совершенно аналогично можно доказать соотношение

$$\sum_c \langle \Phi_a^{(L)} | S | \Phi_c^{(L)} \rangle \langle \Phi_c^{(L)} | S^\dagger | \Phi_b^{(L)} \rangle = \delta_{a, b},$$

из которого вытекает, что в отличие от волнового оператора $U(0, \mp\infty)$ S -оператор унитарен независимо от того, имеет или нет полный гамильтониан H связанные состояния:

$$S^\dagger S = S S^\dagger = 1. \quad (2.66)$$

Это значит, что в ходе рассеяния сохраняется полная вероятность.

Согласно формуле (2.26),

$$H U(0, \mp\infty) = U(0, \mp\infty) H_0. \quad (2.67)$$

Произведем в этой формуле эрмитово сопряжение:

$$U(\mp\infty, 0) H = H_0 U(\pm\infty, 0). \quad (2.68)$$

Тогда, умножив обе части равенства (2.67) на $U(+\infty, 0)$ слева, получим

$$U(+\infty, 0) H U(0, -\infty) = \\ = U(+\infty, 0) U(0, -\infty) H_0 = S H_0. \quad (2.69)$$

Умножив же обе части равенства (2.68) на $U(0, -\infty)$ справа, получим

$$U(+\infty, 0) H U(0, -\infty) = \\ = H_0 U(+\infty, 0) U(0, -\infty) = H_0 S. \quad (2.70)$$

Это означает, что оператор S коммутирует со свободным гамильтонианом H_0 :

$$[S, H_0] = 0. \quad (2.71)$$

Следовательно, H_0 и S одновременно приводятся к диагональному виду, т. е. в ходе рассеяния сохраняются собственные значения энергии свободного гамильтониана. Подчеркнем, что речь идет не о сохранении полной энергии (в чем нет ничего необычного), а именно о сохранении энергии свободного гамильтониана. Такое утверждение нетривиально. Отметим, что причиной сохранения собственных значений свободного гамильтониана является адиабатическое (квазистатическое) включение взаимодействия.

Д. Вероятность перехода и сечение рассеяния

В связи с формулой (2.8) мы уже указывали, что элемент матрицы рассеяния (2.61)

$$S_{f,i} = \langle \Phi_f^{(L)} | U(\infty, -\infty) | \Phi_i^{(L)} \rangle = \\ = \delta_{f,i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle \quad (2.72)$$

дает амплитуду вероятности перехода системы из собственного состояния $\Phi_i^{(L)}$ оператора H_0 (в котором она находилась при $t = -\infty$) в собственное состояние $\Phi_f^{(L)}$ этого оператора при $t = +\infty$. При $f \neq i$ вероятность перехода $W_{f,i}$ из состояния i в состояние f дается формулой

$$W_{f,i} = |S_{f,i}|^2 = [2\pi \delta(E_f - E_i)]^2 |\langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle|^2. \quad (2.73)$$

Зная свойства δ -функции, можно написать

$$[\delta(E_f - E_i)]^2 = \delta(E_f - E_i) \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\{i(E_f - E_i)t/\hbar\} = \\ = \delta(E_f - E_i) \frac{\tau}{2\pi\hbar}, \quad (2.74)$$

где τ — бесконечный интервал времени (от $-\infty$ до $+\infty$). Величина $W_{f,i}$ — вероятность перехода за бесконечно большой интервал времени τ . Вероятность же перехода в единицу времени $w_{f,i}$ выразится формулой

$$w_{f,i} = \frac{W_{f,i}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle|^2. \quad (2.75)$$

Рассмотрим рассеяние частицы в случае статического потенциала, т. е. столкновение двух частиц. Собственное значение энергии такой системы в конечном состоянии E_f принадлежит непрерывному спектру. Реально наблюдают суперпозицию состояний, энергии которых лежат в узком интервале ΔE_f вблизи E_f , а направление рассеянной частицы реально можно указать только с точностью до малого телесного угла $\Delta\Omega_f$. Следовательно, в конечном состоянии нужно брать сумму выражений (2.75) по состояниям в пределах $\Delta E_f \Delta\Omega_f$. Соответствующие состояния характеризуются волновыми векторами k_f , число которых в малой области $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ (с учетом соотношений типа $k_x = 2\pi n_x/L$) равно

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z. \quad (2.76)$$

Если $E_f = \hbar^2 k_f^2/2m$, то $\Delta E_f = (\hbar^2/m) k_f \Delta k_f$ и можно написать $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = k_f^2 \Delta k_f \Delta\Omega_f = (m/\hbar^2) k_f \Delta E_f \Delta\Omega_f$, откуда вытекает, что число состояний в области $\Delta E_f \Delta\Omega_f$ равно

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} k_f \Delta E_f \Delta\Omega_f. \quad (2.77)$$

Взяв сумму конечных состояний (2.75) по этой области, получим для вероятности перехода выражение

$$\begin{aligned} & \sum_f \omega_{f,i} \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} \Delta\Omega_f \int_{\Delta E_f} k_f dE_f \delta(E_i - E_f) |\langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle|^2 = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} \Delta\Omega_f k_f |\langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Энергия начального состояния E_i заключена в интервале ΔE_f . В противном случае вероятность перехода равна нулю. Это — следствие закона сохранения энергии.

Итак, если начальное состояние $\Phi_i^{(L)}$ задано, то вероятность перехода имеет вид (2.78). Число частиц N_i , падающих в единицу времени на единицу поверхности, согласно формуле (2.28) и формуле (3.2) из гл. 2, равно

$$N_i = \frac{\hbar k_i}{L^3 m}. \quad (2.79)$$

Учтем теперь, что дифференциальное сечение рассеяния $\sigma(\theta)$ есть вероятность того, что при переходе частица рассеивается в единичный телесный угол в направлении под углом θ к вектору \mathbf{k}_i , при условии что в одну секунду на единицу площади падает одна частица. Тогда, согласно формуле (2.78), можно написать

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{\sum_f \omega_{f,i} \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z}{\Delta\Omega_f} \left(\frac{\hbar k_i}{L^3 m} \right)^{-1} = \\ &= \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{k_f}{k_i} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} |\langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Нормировка волновых функций $\Phi_f^{(L)}$ и $\Psi_i^{(+)}$ в формуле (2.80) дается формулами (2.33) и (2.34), тогда как в формуле (2.27) из гл. 2 у нас были нормированная плоская волна ϕ_f и волновая функция $\psi_i^{(+)}$. Поэтому

при сравнении формулы (2.80) с формулами (3.4) и (3.5) из гл. 2 волновые функции в формуле (2.80) нужно заменить волновыми функциями гл. 2. Ясно, что в пределе при $L \rightarrow \infty$ выполняются соотношения

$$\Phi_f^{(L)} = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{L^3}} \phi_f, \quad \Psi_i^{(+)} = \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{L^3}} \psi_i^{(+)}, \quad (2.81)$$

с учетом которых, положив в формуле (2.80) $k_i = k_f$, придем к выражению

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} \left(\sqrt{\frac{(2\pi)^3}{L^3}} \right)^4 |\langle \phi_f | V | \psi_i^{(+)} \rangle|^2 = \\ &= \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |\langle \phi_f | V | \psi_i^{(+)} \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Воспользовавшись формулой (3.5) из гл. 2, приведем выражение (2.82) к виду, полностью соответствующему результату (3.4) из гл. 2:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2. \quad (2.83)$$

Подставляя в формулу (2.80) формальное решение (2.23), выполним следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle &= \langle \Phi_f^{(L)} | V \left(1 + \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} V \right) | \Phi_i^{(L)} \rangle = \\ &= \langle \Phi_f^{(L)} | \left(1 + V \frac{1}{E_f - H + i\epsilon} \right) V | \Phi_i^{(L)} \rangle = \\ &= \left\langle \left(1 + \frac{1}{E_f - H - i\epsilon} V \right) \Phi_f^{(L)} \right| V | \Phi_i^{(L)} \rangle = \\ &= \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i^{(L)} \rangle \end{aligned} \quad (2.84)$$

[здесь учтено, что в выражении (2.80) $E_i = E_f$]. С учетом формулы (2.24) перепишем (2.80) в виде

$$\sigma(\theta) = \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{k_f}{k_i} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} |\langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i^{(L)} \rangle|^2. \quad (2.85)$$

Чтобы вычислить сечение рассеяния по формуле (2.80) или (2.85), нужно решить уравнение Липпмана — Швингера (2.22) и подставить его решение в

(2.80) или (2.85). Но можно поступить иначе. Напишем

$$\langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \langle \Phi_f^{(L)} | T(E_i + i\epsilon) | \Phi_i^{(L)} \rangle, \quad (2.86)$$

где по определению

$$T(E_i + i\epsilon) \equiv V + VG(E_i + i\epsilon)V. \quad (2.87)$$

Тогда нужно будет решать интегральное уравнение (2.32) из гл. 2 для G . Чтобы исследовать свойства этого интегрального уравнения, положим

$$G(z) \equiv \frac{1}{z - H}, \quad G_0(z) \equiv \frac{1}{z - H_0}, \quad (2.88)$$

где z — комплексное число. Интегральное уравнение для $G(z)$ имеет вид

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)VG(z). \quad (2.89)$$

Уравнение (2.89) можно решать в той области z , где легко найти решение, а затем аналитически продолжить полученный результат в точку $z = E_i + i\epsilon$ [величина $G(z)$ имеет физический смысл только в точке $z = E_i \pm i\epsilon$]. Аналитическое продолжение этой функции на произвольные значения z называют ее значением *вне энергетической поверхности*. Такое продолжение очень полезно при изучении общих свойств интегральных уравнений, например уравнения (2.32) из гл. 2.

Выше мы свели задачу определения сечения рассеяния к задаче нахождения функции Грина G . Если в соответствии с формулой (2.87) положить

$$T(z) \equiv V + VG(z)V, \quad (2.90)$$

то из уравнения (2.89) можно вывести интегральное уравнение для $T(z)$:

$$T(z) = V + VG_0(z)(1 + VG(z))V = V + VG_0(z)T(z), \quad (2.91)$$

решив которое, можно найти $T(z)$, а затем принять $z = E_i + i\epsilon$.

Е. Оптическая теорема

В заключение параграфа докажем на основе нестационарной теории рассеяния оптическую теорему. Из условия унитарности S -матрицы (2.64) вытекает равенство

$$\sum_f \langle \Phi_i^{(L)} | S^\dagger | \Phi_f^{(L)} \rangle \langle \Phi_f^{(L)} | S | \Phi_i^{(L)} \rangle = 1. \quad (2.92)$$

Подставив сюда выражение (2.61), на основании соотношения (2.40) получим

$$\begin{aligned} \sum_f [\delta_{i,f} + 2\pi i \delta_{f,i} \delta(E_f - E_i) \{ \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle^* - \\ - \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle \} + \\ + (2\pi)^2 \delta^2(E_f - E_i) | \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle |^2] = 1, \end{aligned}$$

откуда следует, что

$$\begin{aligned} 4\pi \operatorname{Im} \langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle + \\ + (2\pi)^2 \sum_f \delta(E_f - E_i) | \langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle |^2 = 0. \end{aligned}$$

Преобразуя второй член в левой части этого равенства с учетом формулы (2.75), получаем соотношение

$$\frac{-2}{\hbar} \operatorname{Im} \langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \sum_f \omega_{f,i}, \quad (2.93)$$

выражающее оптическую теорему в нестационарной теории рассеяния.

Докажем, что оптическая теорема (2.93) совпадает с оптической теоремой (3.18) из гл. 2. Пользуясь соотношениями (2.81), изменим нормировку волновых функций. Тогда на основании формулы (3.5) из гл. 2 получим

$$\langle \Phi_i^{(L)} | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \frac{(2\pi)^3}{L^3} \langle \phi_i | V | \psi_i^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi}{L^3} \frac{\hbar^2}{m} f(0). \quad (2.94)$$

Принимая во внимание формулу (2.78) и учитывая, что сумма в правой части равенства (2.93) берется

по числу конечных состояний, напишем

$$\sum_f \omega_{f,i} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} k_f \int d\Omega_f |\langle \Phi_f^{(L)} | V | \Psi_i^{(L)} \rangle|^2.$$

Изменим здесь нормировку волновых функций, вынесем интенсивность потока в падающей плоской волне $\hbar k_i / L^3 m$ в виде отдельного множителя, положим $k_i = k_f$ и выполним преобразование:

$$\begin{aligned} \sum_f \omega_{f,i} &= \frac{\hbar k_i}{L^3 m} \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} \left(\frac{(2\pi)^3}{L^3} \right)^2 \int d\Omega_f |\langle \phi_f | V | \psi_i^{(+)} \rangle|^2 = \\ &= \frac{\hbar k_i}{L^3 m} \left[\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \right]^2 \int d\Omega_f |\langle \phi_f | V | \psi_i^{(+)} \rangle|^2 = \\ &= \frac{\hbar k_i}{L^3 m} \int d\Omega_f |f(\theta)|^2 = \frac{\hbar k_i}{L^3 m} \sigma^{\text{полн}}. \end{aligned} \quad (2.95)$$

Подставляя выражения (2.94) и (2.95) в формулу (2.93), получаем

$$\text{Im } f(0) = \frac{k_i}{4\pi} \sigma^{\text{полн}}, \quad (2.96)$$

что совпадает с формулой (3.18) из гл. 2.

§ 3. Принцип детального равновесия и обращение времени

Выражение (2.75) для вероятности перехода в борновском приближении принимает вид

$$\omega_{a,b}^{(B)} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_a - E_b) |\langle \Phi_a^{(L)} | V | \Phi_b^{(L)} \rangle|^2. \quad (3.1)$$

Вероятность обратного процесса в борновском приближении будет

$$\omega_{b,a}^{(B)} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_b - E_a) |\langle \Phi_b^{(L)} | V | \Phi_a^{(L)} \rangle|^2. \quad (3.2)$$

Поскольку

$$\langle \Phi_a^{(L)} | V | \Phi_b^{(L)} \rangle^* = \langle \Phi_b^{(L)} | V^{(+)} | \Phi_a^{(L)} \rangle = \langle \Phi_b^{(L)} | V | \Phi_a^{(L)} \rangle, \quad (3.3)$$

вероятность $\omega_{a,b}^{(B)}$ перехода из состояния $\Phi_b^{(L)}$ в состояние $\Phi_a^{(L)}$ равна вероятности обратного перехода — из области $\Phi_a^{(L)}$ в состояние $\Phi_b^{(L)}$:

$$\omega_{a,b}^{(B)} = \omega_{b,a}^{(B)}. \quad (3.4)$$

Соотношение (3.4) можно переписать в виде соотношения для дифференциальных сечений. С учетом формулы (2.82) получим

$$\sigma_{a,b}^{(B)}(\theta) = \sigma_{b,a}^{(B)}(\theta). \quad (3.5)$$

Если волновое число k_a состояния $\Phi_a^{(L)}$ не равно волновому числу k_b состояния $\Phi_b^{(L)}$, то, согласно формуле (2.80), соотношение (3.5) переписывается в виде

$$\frac{\sigma_{a,b}^{(B)}(\theta)}{k_a^2} = \frac{\sigma_{b,a}^{(B)}(\theta)}{k_b^2}. \quad (3.6)$$

Соотношения (3.4) — (3.6) выражают так называемый *принцип детального равновесия*. Цель настоящего параграфа — выяснить, выполняется ли этот принцип точно независимо от каких бы то ни было приближений или нет.

Легко сообразить, что принцип детального равновесия связан с *обращением времени*. Поэтому сначала рассмотрим отражение времени в ньютоновской механике. Пусть частица массы m движется в поле с потенциалом $V(\mathbf{r})$. Уравнение ее движения имеет вид

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = - \text{grad } V(\mathbf{r}(t)). \quad (3.7)$$

Пусть его решением будет некая функция

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t). \quad (3.8)$$

Схематически эта траектория показана на фиг. 32, а. Обратим ось времени (как показано на фиг. 32, а пунктиром). Тогда старая и новая временные координаты одной и той же мировой точки P связаны соотношением

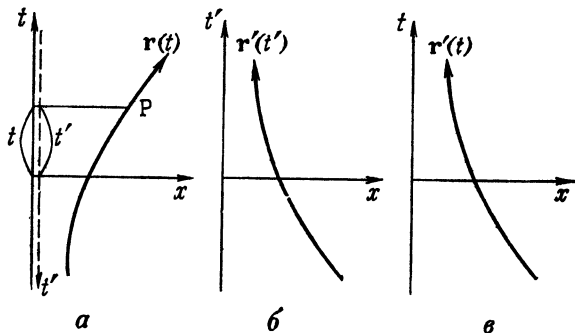
$$t' = -t. \quad (3.9)$$

После перехода к новой временной координате t' получим

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(-t') = \mathbf{r}'(t'). \quad (3.10)$$

Второе из равенств (3.10) выражает изменение формы функции при замене ее аргумента $-t'$ аргументом t' .

Функция $\mathbf{r}'(t')$, представляющая траекторию в системе с новой временной осью, описывает движение той же самой частицы, но форма траектории отличается от траектории $\mathbf{r}(t)$. Новая траектория показана на фиг. 32, б. Если в функции $\mathbf{r}'(t')$ аргумент t' заменить



Фиг. 32. Обращение времени.

a — инверсия временной оси координат; *б* — обращение времени; *в* — обратное движение.

аргументом t , то полученная функция $\mathbf{r}'(t)$ будет описывать движение, обратное движению, описываемому функцией $\mathbf{r}(t)$. Это обратное движение показано на фиг. 32, в. Таким образом, движение $\mathbf{r}'(t)$, обратное движению $\mathbf{r}(t)$, дается соответствием

$$\mathbf{r}(t) \rightarrow \mathbf{r}'(t). \quad (3.11)$$

Выясним теперь соответствие импульсами частицы. Цепочка равенств

$$\mathbf{p}(t) = m \frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = -m \frac{d\mathbf{r}(-t')}{dt'} = -m \frac{d\mathbf{r}'(t')}{dt'} = -\mathbf{p}'(t')$$

показывает, что соответствие между импульсом $\mathbf{p}(t)$ прямого движения и импульсом $\mathbf{p}'(t')$ обратного движения таково:

$$\mathbf{p}(t) \rightarrow -\mathbf{p}'(t'). \quad (3.12)$$

Переписывая уравнение (3.7) с учетом (3.9) и (3.10), получаем

$$m \frac{d^2\mathbf{r}'(t')}{dt'^2} = -\text{grad}' V(\mathbf{r}'(t')). \quad (3.13)$$

Заменяем здесь величину t' величиной t :

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}'(t)}{dt^2} = - \text{grad}' V(\mathbf{r}'(t)). \quad (3.14)$$

Сравнивая полученное равенство с равенством (3.7), видим, что если $\mathbf{r}(t)$ — решение уравнения движения, то решением того же самого уравнения будет и обратное движение $\mathbf{r}'(t)$. Следовательно, в ньютоновской механике движение обратимо. Имеется ли подобная обратимость движения также и в квантовой механике?

Чтобы выяснить связь между прямым и обратным движением в квантовой механике, рассмотрим сначала движение, описываемое плоской волной. Если волновая функция прямого движения имеет вид

$$\Phi_{\mathbf{p}}^{(L)}(t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) \exp(-iE_{\mathbf{p}}t/\hbar), \quad (3.15)$$

то переход к обратному движению должен выразиться заменой $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$:

$$\Phi_{-\mathbf{p}}^{(L)}(t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) \exp(-iE_{\mathbf{p}}t/\hbar). \quad (3.16)$$

Здесь мы воспользовались соотношением $E_{-\mathbf{p}} = E_{\mathbf{p}}$. Так же как и при выводе обратного движения в классической механике, произведем замену (3.9) в выражении (3.15):

$$\Phi_{\mathbf{p}}'^{(L)}(t') \equiv \Phi_{\mathbf{p}}^{(L)}(-t') = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp\{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + E_{\mathbf{p}}t')/\hbar\}. \quad (3.17)$$

Заменяя здесь t' на t , получим функцию, описывающую движение в направлении $-\mathbf{p}$:

$$\Phi_{\mathbf{p}}'^{(L)}(t) \equiv \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp\{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + E_{\mathbf{p}}t)/\hbar\}, \quad (3.18)$$

которая, однако, не совпадает с волновой функцией обратного движения (3.16). Функция (3.16) получится, если произвести комплексное сопряжение:

$$\Phi_{\mathbf{p}}'^{(L)*}(t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp\{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + E_{\mathbf{p}}t)/\hbar\} = \Phi_{-\mathbf{p}}^{(L)}(t). \quad (3.19)$$

Таким образом, для получения обратного движения в квантовой механике к процедуре, производимой в классической механике, нужно добавить комплексное сопряжение волновой функции.

Учтя эти предварительные соображения, рассмотрим общее уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = H\Psi(t). \quad (3.20)$$

Выполняя преобразование (3.9), получаем

$$-i\hbar \frac{d\Psi(-t')}{dt'} = H\Psi(-t'). \quad (3.21)$$

Переписывая волновую функцию в виде

$$\Psi(-t') = \Psi'(t') \quad (3.22)$$

и заменяя t' на t , приводим уравнение к виду

$$-i\hbar \frac{d\Psi'(t)}{dt} = H\Psi'(t). \quad (3.23)$$

Следуя процедуре (3.19), произведем комплексное сопряжение обеих частей равенства:

$$i\hbar \frac{d\Psi'^*(t)}{dt} = H^*\Psi'^*(t). \quad (3.24)$$

Если гамильтониан бесспиновых частиц имеет вид

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i>1} V(r_{ij}), \quad (3.25)$$

то

$$H^* = H, \quad (3.26)$$

откуда следует, что уравнение (3.24) эквивалентно уравнению

$$i\hbar \frac{d\Psi'^*(t)}{dt} = H\Psi'^*(t). \quad (3.27)$$

Итак, если $\Psi(t)$ — решение уравнения Шредингера (3.20), то его решением является также и волновая функция обратного движения $\Psi'^*(t)$, т. е. квантовое движение тоже обратимо.

Выше гамильтониан H мы считали действительным оператором, удовлетворяющим соотношению (3.26).

Но вообще H не действительный, а эрмитов оператор, т. е. $H = H^\dagger$, а не $H = H^*$. Например, при наличии спин-орбитального взаимодействия (L — орбитальный, и S — спиновый момент) гамильтониан H имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) + \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \xi(r). \quad (3.28)$$

Спиновый момент \mathbf{s} можно записать в виде $\mathbf{s} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$, где $\boldsymbol{\sigma}$ — двухрядные двухстолбцовые матрицы Паули

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

удовлетворяющие соотношениям

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \\ \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z, \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z \sigma_x &= -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y, \end{aligned} \quad (3.30)$$

а оператор орбитального момента можно представить в виде

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times \nabla. \quad (3.31)$$

Следовательно, комплексное сопряжение слагаемого $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}$ в формуле (3.28) дает, согласно (3.29) и (3.31),

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L})^* &= \sigma_x^* L_x^* + \sigma_y^* L_y^* + \sigma_z^* L_z^* = \\ &= -\sigma_x L_x + \sigma_y L_y - \sigma_z L_z, \end{aligned} \quad (3.32)$$

откуда ясно, что $H^* \neq H$, несмотря на то, что остальные величины $V(r)$ и $\xi(r)$, входящие в H , действительны. Следовательно, для таких H уравнение (3.27) не имеет места и можно получить только уравнение (3.24). Поэтому рассмотрим оператор R , действующий только на спиновые переменные, так, чтобы выполнялось условие

$$H^* = R^{-1} H R, \quad (3.33)$$

или, что то же,

$$H = R H^* R^{-1}. \quad (3.34)$$

Подставляя (3.33) в (3.24), приходим к уравнению

$$i\hbar \frac{dR\Psi'^*(t)}{dt} = HR\Psi'^*(t), \quad (3.35)$$

показывающему, что если $\Psi(t)$ удовлетворяет уравнению (3.20), то $R\Psi'^*$ тоже решение этого уравнения. Эта величина и будет в данном случае волновой функцией обратного движения. Обозначив волновую функцию обратного движения символом $\Psi^R(t)$, напишем в общем случае

$$\Psi^R(t) = R\Psi'^*(t). \quad (3.36)$$

Введем оператор комплексного сопряжения, который мы обозначим через K . Тогда

$$\Psi^R(t) = RK\Psi'(t) = RK\Psi(-t)$$

и можно доказать соотношения

$$\begin{aligned} (RK)\sigma(RK)^{-1} &= -\sigma, & (RK)L(RK)^{-1} &= -L, \\ (RK)\mathbf{r}(RK)^{-1} &= \mathbf{r}, & (RK)\mathbf{p}(RK)^{-1} &= -\mathbf{p}, \end{aligned}$$

из которых вытекает, что RK не унитарный, а антиунитарный оператор. Больше оператор K нам не понадобится.

Но существуют ли реально операторы R , удовлетворяющие соотношению (3.33)? Не рассматривая этот вопрос в общем виде, заметим, что в случае примера (3.28) можно принять $R=R^{-1}=\sigma_y$. В самом деле, используя соотношения (3.30) и имея в виду формулу (3.32), получим

$$\begin{aligned} R^{-1}(\sigma \cdot L)R &= R^{-1}\sigma R \cdot L = \\ &= \sigma_y \sigma_x \sigma_y L_x + \sigma_y \sigma_y \sigma_y L_y + \sigma_y \sigma_z \sigma_y L_z = \\ &= -\sigma_x L_x + \sigma_y L_y - \sigma_z L_z = (\sigma \cdot L)^* \end{aligned} \quad (3.37)$$

Заметим еще, что, хотя все результаты выше были получены нами с использованием определенных частных представлений операторов \mathbf{r} , \mathbf{p} , σ , можно доказать, что они справедливы независимо от представления этих операторов. Применим теперь изложенные общие соображения об обращении времени к задаче о рассея-

нии. Полный гамильтониан H системы, в которой происходит рассеяние, разделим на два слагаемых:

$$H = H_0 + V. \quad (3.38)$$

Обычно как H_0 , так и V содержат спиновые переменные σ . Предположим, что оператор R , удовлетворяющий условиям

$$H_0^* = R^{-1}H_0R, \quad V^* = R^{-1}VR, \quad (3.39)$$

существует, т. е. рассматриваемая система обратима. Состояние $\Phi_a^{(L), R}$, в котором движение обращено по сравнению с движением в собственном состоянии $\Phi_a^{(L)}$ гамильтониана H_0 , согласно формуле (3.36), дается выражением

$$\Phi_a^{(L), R} = R\Phi_a^{(L)*}. \quad (3.40)$$

Но в силу формулы (3.19) для пространственной части волновой функции $\Phi_a^{(L)}$ выполняется соотношение

$$\Phi_p^{(L)*} = \Phi_{-p}^{(L)}. \quad (3.41)$$

Далее, например, в результате действия оператора $R = \sigma_y$ на состояние $v(+)$ со спином, ориентированным вверх, это состояние переходит в состояние $v(-)$ со спином, ориентированным вниз:

$$Rv(+)=\sigma_y\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}=i\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}=\exp(i\pi/2)v(-).$$

Следовательно, если включить в определение волновой функции $\Phi_a^{(L)}$ фазовый множитель $\exp(i\pi/2)$, то в общем случае можно написать

$$\Phi_a^{(L), R} = R\Phi_a^{(L)*} = \Phi_{-a}^{(L)}. \quad (3.42)$$

Здесь индекс a означает совокупность квантовых чисел импульса и спина. В формулах (3.40) и (3.41) мы рассматриваем стационарные, т. е. не зависящие от времени, состояния. Поэтому нам не нужно изменять форму функциональной зависимости [при переобозначении временной переменной в (3.36) и (3.19), вообще говоря, изменяется форма функциональной зависимо-

сти]. Далее, согласно формуле (2.19), волновая функция состояния рассеяния имеет вид

$$\Psi_a^{(+)} = U(0, -\infty) \Phi_a^{(L)} = \left(1 + \frac{1}{E_a - H + i\epsilon} V\right) \Phi_a^{(L)}. \quad (3.43)$$

Для состояния с обратным движением

$$\Psi_a^{(+), R} \equiv R \Psi_a^{(+)*} = R \left(1 + \frac{1}{E_a - H^* - i\epsilon} V^*\right) \Phi_a^{(L)*}. \quad (3.44)$$

Пользуясь здесь предположением (3.39) и свойством (3.42), получим

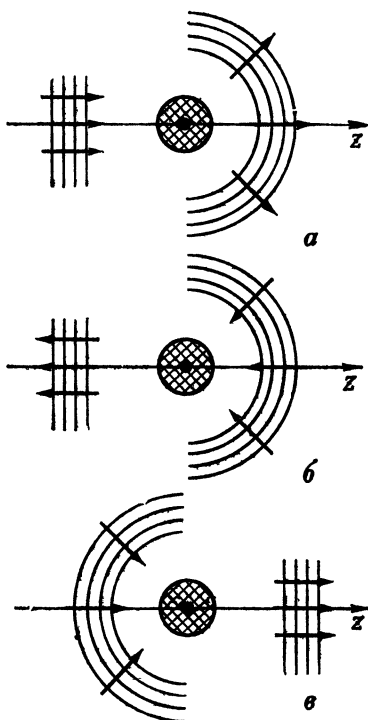
$$\begin{aligned} \Psi_a^{(+), R} &= R \left(1 + \frac{1}{E_a - H^* - i\epsilon} V^*\right) R^{-1} R \Phi_a^{(L)*} = \\ &= \left(1 + \frac{1}{E_a - H - i\epsilon} V\right) \Phi_{-a}^{(L)} = \\ &= \Phi_{-a}^{(L)} + \frac{1}{E_a - H_0 - i\epsilon} V \Psi_a^{(+), R}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Картина рассеяния в этом состоянии показана на фиг. 33, б. Движение в нем, несомненно, обратное движению в состоянии $\Psi_a^{(+)}$. Заметим, что состояния рассеяния $\Psi_a^{(-)}$ и $\Psi_a^{(+), R}$, содержащие сходящуюся сферическую волну, различаются тем, что в них противоположное направление распространения плоской волны.

Рассмотрим теперь амплитуду рассеяния. Замечая, что $R^\dagger = R^{-1}$, выполним на энергетической поверхности $E = E_a = E_b$ следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{-b}^{(L)} | V | \Psi_{-a}^{(+)} \rangle &= \langle \Phi_{-b}^{(L)} | V \left(1 + \frac{1}{E - H + i\epsilon} V\right) | \Phi_{-a}^{(L)} \rangle = \\ &= \langle R \Phi_b^{(L)*} | V \left(1 + \frac{1}{E - H + i\epsilon} V\right) | R \Phi_a^{(L)*} \rangle = \\ &= \langle \Phi_b^{(L)*} | R^{-1} V \left(1 + \frac{1}{E - H + i\epsilon} V\right) R | \Phi_a^{(L)*} \rangle = \\ &= \langle \Phi_b^{(L)*} | V^* + V^* \frac{1}{E - H^* + i\epsilon} V^* | \Phi_a^{(L)*} \rangle = \\ &= \langle \Phi_b^{(L)} | V + V \frac{1}{E - H - i\epsilon} V | \Phi_a^{(L)} \rangle^* = \\ &= \langle \Phi_a^{(L)} | V^\dagger + V^\dagger \frac{1}{E - H^\dagger + i\epsilon} V^\dagger | \Phi_b^{(L)} \rangle = \\ &= \langle \Phi_a^{(L)} | V \left(1 + \frac{1}{E - H + i\epsilon} V\right) | \Phi_b^{(L)} \rangle = \\ &= \langle \Phi_a^{(L)} | V | \Psi_b^{(+)} \rangle, \end{aligned}$$

при выводе которого для получения второго равенства нужно воспользоваться свойством (3.42), третьего — условием $R^+ = R^-$, четвертого — гипотезой (3.39), а



Фиг. 33. Волновые функции задачи рассеяния.

a — волновая функция $\Psi_a^{(+)}$; $б$ — волновая функция $\Psi_a^{(+), R}$; $в$ — волновая функция $\Psi_a^{(-)}$.

седьмого — эрмитовостью операторов H и V . Тем самым мы доказали, что если верна гипотеза об обратимости системы, то выполняется соотношение

$$\langle \Phi_{-b}^{(L)} | V | \Psi_{-a}^{(+)} \rangle = \langle \Psi_a^{(L)} | V | \Psi_b^{(+)} \rangle, \quad (3.46)$$

которое с помощью формулы (2.75) можно привести к виду

$$\omega_{-b, -a} = \omega_{a, b}. \quad (3.47)$$

Полученное соотношение называют *соотношением взаимности* в отличие от *принципа детального равновесия*, выражаемого равенством

$$\omega_{b, a} = \omega_{a, b}, \quad (3.48)$$

хотя и напоминающим (3.47), но не совпадающим с ним. Различие между соотношениями (3.47) и (3.48) наглядно показано на фиг. 34.

	Конечное состояние	Начальное состояние
$\omega_{a,b}$		
$\omega_{-b,-a}$		
$\omega_{b,a}$		

Фиг. 34. Соотношение взаимности и детальное равновесие.

При каких условиях справедлив принцип детального равновесия? Рассмотрим столкновение двух частиц. В качестве квантовых чисел a состояния $\Phi_a^{(L)}$ возьмем импульс относительного движения частиц p_a и собственные значения спина s_1 и s_2 , а в качестве кван-

товых чисел b состояния $\Phi_b^{(L)}$ соответственно \mathbf{p}_b, s'_1, s'_2 . Подчеркнем, что в силу соотношения (3.42) в обратном движении, кроме знака относительного импульса, меняются на обратные и знаки спинов. Следовательно, амплитуды вероятности прямого и обратного движения будут такими:

$$\langle \Phi_a^{(L)} | V | \Psi_b^{(+)} \rangle = \langle \mathbf{p}_a, s_1, s_2 | T(E + i\epsilon) | \mathbf{p}_b, s'_1, s'_2 \rangle, \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{-b}^{(L)} | V | \Psi_{-a}^{(+)} \rangle &= \\ &= \langle -\mathbf{p}_b, -s'_1 - s'_2 | T(E + i\epsilon) | -\mathbf{p}_a, -s_1, -s_2 \rangle. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Здесь $T(E + i\epsilon)$ — оператор, определенный в формуле (2.87); кроме того, использованы символы Дирака «бра» и «кет»:

$$|\Phi_a^{(L)}\rangle \equiv |a\rangle, \quad \langle \Phi_b^{(L)}| \equiv \langle b|, \quad (3.51)$$

в которых, как в явном виде записано в формуле (3.5) из гл. 2, подразумевается интегрирование по переменной \mathbf{r} волновой функции. Перепишем интеграл по относительной координате \mathbf{r} как интеграл по $-\mathbf{r}$. При этом меняется знак показателя в $\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})$ плоской волны и величины $H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ и $V(\mathbf{r})$, входящие в оператор $T(E + i\epsilon)$, нужно заменить величинами $H_0(-\mathbf{r}, -\mathbf{p})$ и $V(-\mathbf{r})$. Если при инверсии пространственных координат эти величины не изменяются, т. е. если

$$H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = H_0(-\mathbf{r}, -\mathbf{p}), \quad V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r}), \quad (3.52)$$

то формулу (3.50) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{-b}^{(L)} | V | \Psi_{-a}^{(+)} \rangle &= \\ &= \langle \mathbf{p}_b, -s'_1, -s'_2 | T(E + i\epsilon) | \mathbf{p}_a, -s_1, -s_2 \rangle. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Тогда с учетом соотношения взаимности (3.47) получим

$$\begin{aligned} &|\langle \mathbf{p}_a, s_1, s_2 | T(E + i\epsilon) | \mathbf{p}_b, s'_1, s'_2 \rangle|^2 = \\ &= |\langle \mathbf{p}_b, -s'_1, -s'_2 | T(E + i\epsilon) | \mathbf{p}_a, -s_1, -s_2 \rangle|^2. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Рассмотрим вероятность перехода, при котором в обеих частях последнего равенства нужно просумми-

ровать по положительным и отрицательным собственным значениям спина. С учетом формулы (2.75) для соответствующих процессов можно тогда написать

$$\omega(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_a - E_b) \times \\ \times \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ s'_1, s'_2}} |\langle \mathbf{p}_a, s_1, s_2 | T(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_b, s'_1, s'_2 \rangle|^2, \quad (3.55)$$

$$\omega(\mathbf{p}_b, \mathbf{p}_a) = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_b - E_a) \times \\ \times \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ s'_1, s'_2}} |\langle \mathbf{p}_b, -s'_1, -s'_2 | T(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_a, -s_1, -s_2 \rangle|^2, \quad (3.56)$$

откуда явствует, что

$$\omega(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) = \omega(\mathbf{p}_b, \mathbf{p}_a). \quad (3.57)$$

Итак, мы показали, что в случае обратимой системы, для которой H_0 и V инвариантны относительно инверсии пространственных координат, принцип детального равновесия справедлив для вероятности перехода, просуммированной по спинам.

Перепишем соотношение (3.57) в виде соотношения для дифференциальных сечений рассеяния. Усреднив вероятность по спинам начального состояния и взяв сумму по спинам в конечном состоянии, получим с учетом формулы (2.80)

$$\sigma(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) = \frac{k_a}{k_b} \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} \frac{1}{(2s'_1 + 1)(2s'_2 + 1)} \times \\ \times \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ s'_1, s'_2}} |\langle \mathbf{p}_a, s_1, s_2 | T(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_a, s'_1, s'_2 \rangle|^2, \quad (3.58)$$

$$\sigma(\mathbf{p}_b, \mathbf{p}_a) = \frac{k_b}{k_a} \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} \frac{1}{(2s_1 + 1)(2s_2 + 1)} \times \\ \times \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ s'_1, s'_2}} |\langle \mathbf{p}_b, -s'_1, -s'_2 | T(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_a, -s_1, -s_2 \rangle|^2, \quad (3.59)$$

откуда вытекает, что соотношение между дифференциальными сечениями рассеяния таково:

$$\begin{aligned} \sigma(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) (2s'_1 + 1) (2s'_2 + 1) k_b^2 = \\ = \sigma(\mathbf{p}_b, \mathbf{p}_a) (2s_1 + 1) (2s_2 + 1) k_a^2. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Если при рассеянии спин не изменяется, то можно определить спин неизвестной частицы, измерив дифференциальные сечения в обеих частях равенства (3.60).

§ 4. Взаимное рассеяние тождественных частиц

До сих пор мы считали, что рассеиваемая частица отличается от частицы-мишени. Если же рассматриваемая система содержит тождественные частицы, то, согласно принципам квантовой механики, ее волновая функция должна быть симметричной или антисимметричной относительно перестановок тождественных частиц. Рассмотрим столкновение двух тождественных частиц, взаимодействие которых описывается потенциалом. Вопрос о симметрии или антисимметрии волновой функции в несколько более сложной системе будет рассмотрен в гл. 5.

Дифференциальное сечение упругого столкновения двух частиц выражается формулой (2.82). Но в данном случае волновые функции начального ϕ_i и конечного ϕ_f состояний нужно заменить симметризованными или антисимметризованными волновыми функциями ϕ_i^S и ϕ_f^S . Именно, для сечения нужно написать

$$\sigma(\theta) = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |\langle \phi_f^S | T(E_i + i\epsilon) | \phi_i^S \rangle|^2, \quad (4.1)$$

где

$$\begin{aligned} \phi_i^S(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_k(\mathbf{r}) \pm \phi_k(-\mathbf{r})], \\ \phi_f^S(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{k'}(\mathbf{r}) \pm \phi_{k'}(-\mathbf{r})], \end{aligned} \quad (4.2)$$

m — приведенная масса сталкивающихся частиц, \mathbf{r} — вектор их относительного положения, \mathbf{k} и \mathbf{k}' — волно-

вые векторы относительного движения в начальном и конечном состояниях. Множитель $1/\sqrt{2}$ в выражениях (4.2) обусловлен нормировкой. В случае тождественности частиц очевидно, что

$$H_0(-\mathbf{p}, -\mathbf{r}) = H_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}), \quad V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \quad (4.3)$$

(эти величины не изменяются при перестановке двух частиц). Следовательно, при перестановке двух частиц не изменяется также и величина

$$T(E_i + i\varepsilon) \equiv T_r(E_i + i\varepsilon) = V(\mathbf{r}) + \frac{1}{E_k - H + i\varepsilon} V(\mathbf{r}), \quad (4.4)$$

т. е. выполняется соотношение

$$T_{-\mathbf{r}}(E_i + i\varepsilon) = T_{+\mathbf{r}}(E_i + i\varepsilon). \quad (4.5)$$

Поэтому если во втором и третьем членах выражения

$$\begin{aligned} \langle \phi_f^S | T(E_i + i\varepsilon) | \phi_i^S \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} [\phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \\ &\quad + \phi_{\mathbf{k}'}^*(-\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(-\mathbf{r}) \pm \\ &\quad \pm \phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(-\mathbf{r}) \pm \phi_{\mathbf{k}'}^*(-\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})] \end{aligned}$$

произвести замену переменной интегрирования $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ с учетом равенства (4.5), то можно написать

$$\begin{aligned} \langle \phi_f^S | T(E_i + i\varepsilon) | \phi_i^S \rangle &= \\ &= \int d^3\mathbf{r} [\phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \pm \\ &\quad \pm \phi_{\mathbf{k}'}^*(-\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})], \quad (4.6) \end{aligned}$$

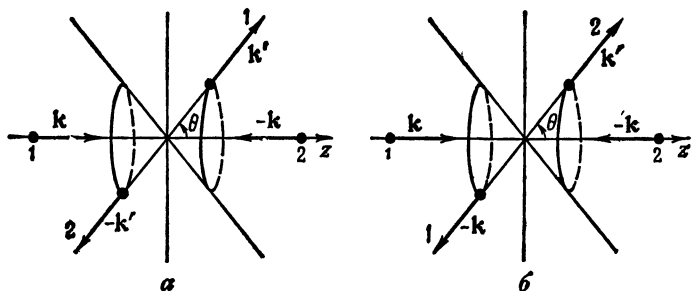
откуда вытекает, что дифференциальное сечение (4.1) дается формулой

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} \left| \int d^3\mathbf{r} \phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \int d^3\mathbf{r} \phi_{\mathbf{k}'}^*(-\mathbf{r}) T_r(E_i + i\varepsilon) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right|^2, \quad (4.7) \end{aligned}$$

а полное сечение $\sigma^{\text{полн}}$ — формулой

$$\sigma^{\text{полн}} = \frac{1}{2} \int \sigma(\theta) d\Omega = \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sigma(\theta). \quad (4.8)$$

Таким образом, в случае тождественных частиц пределы интегрирования по углу рассеяния вдвое меньше, чем в случае различных частиц: по θ нужно интегрировать от 0 до $\pi/2$. Причина этого объяснена на



Фиг. 35. Интеграл полного сечения.

фиг. 35: в случае различных частиц процессы, показанные на фиг. 35, а и б, разные, а в случае тождественных частиц они неразличимы (оба случая соответствуют одному и тому же процессу), вследствие чего при интегрировании по углу рассеяния θ в пределах от 0 до π число рассеянных частиц было бы завышено вдвое.

Вычислим выражение (4.7) в борновском приближении. Приняв для волновых функций выражения

$$\phi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}); \quad \phi_{k'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}), \quad (4.9)$$

подставив эти выражения в формулу (4.7) и вычислив первое борновское приближение, получим

$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{m^2}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left| \int d^3\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \exp(+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \pm \int d^3\mathbf{r} \exp(+i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \exp(+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right|^2. \quad (4.10)$$

Вводя обозначения (фиг. 36)

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{k}' + \mathbf{k}, \quad (4.11)$$

напишем

$$K = 2k \sin(\theta/2), \quad L = 2k \cos(\theta/2). \quad (4.12)$$

Интегрируя выражение (4.10) по углам, получаем

$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{4m^2}{\hbar^4} \left[K^{-1} \int_0^\infty r V(r) \sin(Kr) dr \pm \right. \\ \left. \pm L^{-1} \int_0^\infty V(r) r \sin(Lr) dr \right]^2. \quad (4.13)$$

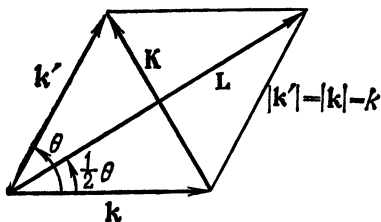
Если потенциал имеет вид

$$V(r) = \frac{e^2}{r} \exp(-\kappa r), \quad (4.14)$$

то

$$\int_0^\infty V(r) r \sin(Kr) dr = \frac{e^2 K}{K^2 + \kappa^2} \xrightarrow{\kappa \rightarrow 0} \frac{e^2}{K}. \quad (4.15)$$

При $\kappa \rightarrow 0$ выражение (4.14) переходит в кулоновский потенциал. Имея в виду, что первое борновское приближение случайно дает правильный результат для



Фиг. 36. Изменение волновых векторов при рассеянии.

резерфордовского рассеяния, вычислим для этого случая сечение по формуле (4.13). Она даст

$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4} \left[\frac{1}{K^4} + \frac{1}{L^4} + \frac{2}{K^2 L^2} \right] = \\ = \frac{e^4}{4m^2 v^4} \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} \pm \frac{2}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right]. \quad (4.16)$$

Первый член, разумеется, совпадает с резерфордовским сечением рассеяния. Следует помнить, что в данном случае m — приведенная масса. Второй член учитывает симметрию (или антисимметрию) волновых функций, а третий — интерференцию первого и второго слагаемых.

Если спин частиц равен нулю (бозе-частицы), то их волновую функцию нужно симметризовать. Например, при рассеянии двух α -частиц (заряд которых равен e), дифференциальное сечение рассеяния выразится в виде

$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{e^4}{4m^2v^4} \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} + \frac{2}{\sin^2(\theta/2)\cos^2(\theta/2)} \right]. \quad (4.17)$$

Рассмотрим теперь взаимное рассеяние двух ферми-частиц со спином $1/2$, например электрон-электронное рассеяние. Если спиновая волновая функция двух частиц симметрична (частицы находятся в триплетном состоянии), то пространственная волновая функция должна быть антисимметричной. Если же спиновая волновая функция антисимметрична (синглетное состояние), то пространственная волновая функция должна быть симметричной. Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния выразится формулой

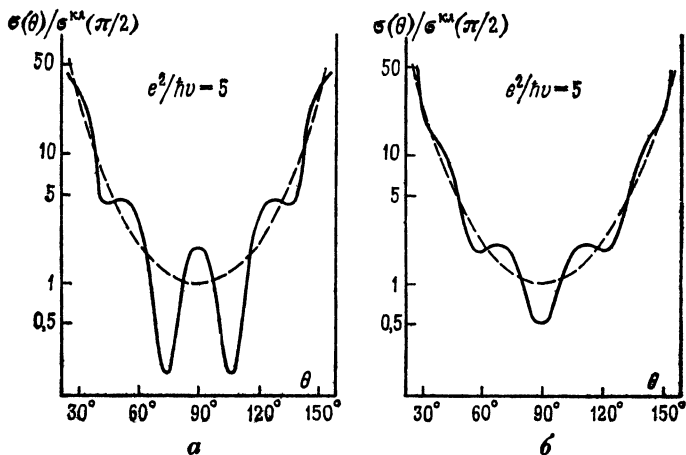
$$\sigma(\theta) = \frac{3}{4} \sigma^{(t)}(\theta) + \frac{1}{4} \sigma^{(s)}(\theta), \quad (4.18)$$

где $\sigma^{(t)}(\theta)$ — дифференциальное сечение рассеяния в триплетном состоянии, а $\sigma^{(s)}(\theta)$ — в синглетном состоянии. Для $\sigma^{(t)}(\theta)$ в формуле (4.16) нужно взять минус, а для $\sigma^{(s)}(\theta)$ — плюс. Тогда получим

$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{e^4}{4m^2v^4} \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} - \frac{1}{\sin^2(\theta/2)\cos^2(\theta/2)} \right]. \quad (4.19)$$

Второе слагаемое в выражениях для дифференциального сечения рассеяния (4.17) и (4.19) появится также и в классической механике, если рассмотреть случай неразличимых частиц, а третье слагаемое — чисто квантового происхождения. Приведенные трехчленные выражения, однако, не являются точными

(они получены в борновском приближении). Точные формулы для дифференциальных сечений рассеяния в случае кулоновского потенциала приведены ниже.



Фиг. 37. Угловые распределения дифференциальных сечений взаимного рассеяния тождественных заряженных частиц.

а — сплошная линия соответствует формуле (4.20), пунктир — $\sigma^{KL}(\theta)$;
 б — сплошная линия соответствует формуле (4.21), пунктир — $\sigma^{KL}(\theta)$.

Дифференциальное сечение взаимного рассеяния двух α -частиц имеет вид

$$\sigma(\theta) = \frac{e^4}{4m^2v^4} \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} + \frac{2 \cos \left[\frac{(e^2/hv) \ln \{ \operatorname{tg}^2(\theta/2) \}}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right]}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right] \quad (4.20)$$

(здесь принято, что заряд α -частиц равен e), а дифференциальное сечение электрон-электронного рассеяния — вид

$$\sigma(\theta) = \frac{e^4}{4m^2v^4} \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} - \frac{\cos \left[\frac{(e^2/hv) \ln \{ \operatorname{tg}^2(\theta/2) \}}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right]}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right]. \quad (4.21)$$

Чем больше безразмерный параметр $e^2/\hbar v$ в третьем слагаемом формул (4.20) и (4.21), тем сильнее осцилляции этого слагаемого. На фиг. 37 представлены угловые зависимости дифференциальных сечений (4.20) и (4.21) при $e^2/\hbar v = 5$. Здесь символом $\sigma^{кл}(\theta)$ обозначены классические дифференциальные сечения, которые получаются, если в формулах (4.20) и (4.21) пренебречь третьим слагаемым. Сечения по вертикальной оси отложены в относительных единицах. Как нетрудно видеть, в случае бозе-частиц (фиг. 37, а) при $\theta = \pi/2$ имеется максимум, а в случае ферми-частиц (фиг. 37, б) — минимум.

§ 5. Рассеяние на многочастичных мишенях

Изучая столкновения частиц, например нейтронов, с физическими телами (построенными из многих атомов) или с атомными ядрами (состоящими из большого числа нуклонов), можно получить сведения об атомной структуре тел или о структуре атомного ядра. Рассмотрим рассеяние частицы многочастичной системой, предполагая, что падающая частица отличается от атомов или нуклонов мишени.

Итак, пусть частица сталкивается с мишенью, состоящей из N тождественных частиц. Гамильтониан всей системы в целом представим в виде

$$H = H_0 + V; \quad H_0 = H_n + H_A, \quad (5.1)$$

где H_n — гамильтониан свободного движения падающей частицы. Если ее масса m , то

$$H_n = \frac{1}{2m} p_n^2. \quad (5.2)$$

Далее, H_A — сложный гамильтониан мишени, построенной из N частиц, V — взаимодействие падающей частицы со всеми частицами мишени, причем

$$V = \sum_{\alpha=1}^N V_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^N V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{\alpha}), \quad (5.3)$$

где \mathbf{r}_n — оператор положения падающей частицы, а \mathbf{r}_{α} — операторы положения частиц мишени. Начальное

(или конечное) состояние системы определяется решениями уравнения

$$H_0 \phi(\mathbf{k}_a, A_a) = E_a \phi(\mathbf{k}_a, A_a), \quad (5.4)$$

в котором

$$\begin{aligned} H_n \phi(\mathbf{k}_a) &= \varepsilon_a \phi(\mathbf{k}_a), \\ \phi(\mathbf{k}_a) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_n), \\ H_A \phi(A_a) &= E_a^A \phi(A_a), \\ E_a &= \mathcal{E}_a + E_a^A, \\ \phi(\mathbf{k}_a, A_a) &= \phi(\mathbf{k}_a) \phi(A_a). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Если энергия E_i начального состояния равна $E_i = \mathcal{E}_i + E_i^A$, то интегральное уравнение (2.91) можно записать в виде

$$T(E_i) = V + VG_0(E_i)T(E_i), \quad (5.6)$$

где E_i — сокращенное обозначение величины $E_i + i\varepsilon$. Ниже всюду, где это не может привести к недоразумениям, мы будем пользоваться таким сокращенным обозначением. В формуле (5.6)

$$G_0(E_i) = (E_i - H_0 + i\varepsilon)^{-1}. \quad (5.7)$$

Производя последовательное разложение выражения в правой части формулы (5.6) и подставляя выражение (5.3) для V , получаем

$$\begin{aligned} T(E_i) &= V + VG_0(E_i)V + VG_0(E_i)VG_0(E_i)V + \dots = \\ &= \sum_{\alpha} V_{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha} G_0(E_i) V_{\beta} + \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \gamma} V_{\alpha} G_0(E_i) V_{\beta} G_0(E_i) V_{\gamma} + \dots, \end{aligned} \quad (5.8)$$

где сумма по $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ берется по всем частицам мишени. В разложении (5.8) взаимодействие падающей частицы с различными частицами мишени входит неупорядоченно, в связи с чем трудно дать ясную физическую интерпретацию процессов рассеяния. Упорядо-

чим ряд (5.8). Введем оператор $\Lambda_\alpha(E_i)$:

$$\Lambda_\beta(E_i) \equiv V_\alpha + V_\alpha G_0(E_i) \sum_\beta V_\beta + \\ + V_\alpha G_0(E_i) \sum_\beta V_\beta G_0(E_i) \sum_\gamma V_\gamma + \dots \quad (5.9)$$

Очевидно, что

$$T(E_i) = \sum_\alpha \Lambda_\alpha(E_i). \quad (5.10)$$

Разобьем сумму по β на два слагаемых — член с $\alpha = \beta$ плюс сумма остальных членов:

$$\Lambda_\alpha(E_i) = V_\alpha + V_\alpha G_0(E_i) V_\alpha + V_\alpha G_0(E_i) V_\alpha G_0(E_i) \sum_\gamma V_\gamma + \dots \\ + V_\alpha G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} V_\beta + V_\alpha G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} V_\beta G_0(E_i) \sum_\gamma V_\gamma + \dots = \\ = V_\alpha + V_\alpha G_0(E_i) \left[V_\alpha + V_\alpha G_0(E_i) \sum_\gamma V_\gamma + \dots \right] + \\ + V_\alpha G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} \left[V_\beta + V_\beta G_0(E_i) \sum_\gamma V_\gamma + \dots \right]. \quad (5.11)$$

Сравнивая последнее из выражений (5.11) с (5.9), получаем

$$\Lambda_\alpha(E_i) = V_\alpha + V_\alpha G_0(E_i) \Lambda_\alpha(E_i) + V_\alpha G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} \Lambda_\beta(E_i), \quad (5.12)$$

откуда

$$\Lambda_\alpha(E_i) = \frac{1}{1 - V_\alpha G_0(E_i)} V_\alpha + \\ + \frac{1}{1 - V_\alpha G_0(E_i)} V_\alpha G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} \Lambda_\beta(E_i). \quad (5.13)$$

Положив здесь

$$T_\alpha(E_i) \equiv \frac{1}{1 - V_\alpha G_0(E_i)} V_\alpha, \quad (5.14)$$

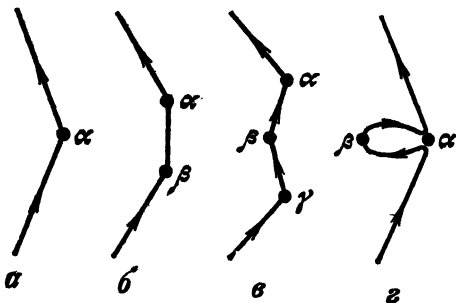
приведем формулу (5.13) к виду

$$\Lambda_\alpha(E_i) = T_\alpha(E_i) + T_\alpha(E_i) G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} \Lambda_\beta(E_i). \quad (5.15)$$

Производя последовательное разложение интегрального уравнения (5.15) и пользуясь формулой (5.10), получаем выражение

$$T(E_i) = \sum_{\alpha} T_{\alpha}(E_i) + \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha}(E_i) G_0(E_i) T_{\beta}(E_i) + \\ + \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{\gamma \neq \beta} T_{\alpha}(E_i) G_0(E_i) T_{\beta}(E_i) G_0(E_i) T_{\gamma}(E_i) + \dots, \quad (5.16)$$

гораздо более прозрачное, нежели выражение (5.8). В самом деле, величина $T_{\alpha}(E_i)$ [формула (5.14)] дает



Фиг. 38. Многократное рассеяние.

амплитуду рассеяния падающей частицы на α -й частице мишени, полностью включающую в себя эффект взаимодействия V_{α} . Первое слагаемое в выражении (5.16) — сумма по всем частицам мишени амплитуд рассеяния падающей частицы на отдельных частицах мишени. Графически это слагаемое представлено на фиг. 38, а. Второе слагаемое в формуле (5.16) учитывает рассеяние падающей частицы на двух частицах мишени (фиг. 38, б), т. е. двукратное рассеяние. Таким образом, формула (5.16) дает разложение по процессам *многократного рассеяния*. В третьем слагаемом содержится член с $\gamma = \alpha$. Это процесс, при котором частица, рассеянная частицей мишени α , сталкивается с другой частицей β , а затем второй раз с частицей α . График такого процесса показан на фиг. 38, г.

Далее, согласно формулам (2.17) и (2.19),

$$\begin{aligned}\psi_i^{(+)} &= U(0, -\infty) \phi(\mathbf{k}_i, A_i) = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} V \right] \phi(\mathbf{k}_i, A_i).\end{aligned}$$

Введем оператор $U(E_i)$:

$$U(E_i) \equiv 1 + \frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} V. \quad (5.17)$$

Выше мы уже упоминали, что операторы такого вида имеют физический смысл только при действии на начальное состояние $\phi(\mathbf{k}_i, A_i)$. Величина (5.17) не является оператором в строгом смысле этого слова, потому что при действии истинного оператора [например, оператора $U(0, -\infty)$] на любое состояние должен получиться результат, имеющий смысл. Преобразуем оператор (5.17), пользуясь формулой (2.87):

$$\begin{aligned}U(E_i) &= 1 + \frac{1}{E_i - H_0 + i\varepsilon} \left[1 + V \frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} \right] V = \\ &= 1 + \frac{1}{E_i - H_0 + i\varepsilon} \left[V + V \frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} V \right] = \\ &= 1 + G_0(E_i) T(E_i).\end{aligned} \quad (5.18)$$

Подставляя сюда разложение (5.16), получаем

$$\begin{aligned}U(E_i) &= 1 + \sum_{\alpha} G_0(E_i) T_{\alpha}(E_i) + \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} G_0(E_i) T_{\alpha}(E_i) G_0(E_i) T_{\beta}(E_i) + \dots\end{aligned} \quad (5.19)$$

Далее, введем оператор $\Omega_{\alpha}(E_i)$ как решение уравнения

$$\Omega_{\alpha}(E_i) = 1 + G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\beta}(E_i) \Omega_{\beta}(E_i). \quad (5.20)$$

Разложим уравнение (5.20) в ряд:

$$\begin{aligned}\Omega_{\alpha}(E_i) &= 1 + \sum_{\beta \neq \alpha} G_0(E_i) T_{\beta}(E_i) + \\ &+ \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{\gamma \neq \beta} G_0(E_i) T_{\beta}(E_i) G_0(E_i) T_{\gamma}(E_i) + \dots\end{aligned}$$

Сравнивая этот ряд с рядом (5.16), замечаем, что

$$T(E_i) = \sum_{\alpha} T_{\alpha}(E_i) \Omega_{\alpha}(E_i). \quad (5.21)$$

Кроме того, через Ω можно выразить также и величину (5.19):

$$U(E_i) = 1 + G_0(E_i) \sum_{\substack{\text{по всем} \\ \beta}} T_{\beta}(E_i) \Omega_{\beta}(E_i). \quad (5.22)$$

Очевидно, что различие между формулами (5.20) и (5.22) сводится к тому, включен или нет в сумму по β член с $\beta = \alpha$. Сравнивая формулу (5.21) с уравнением (5.20), замечаем, что амплитуду рассеяния $T(E_i)$ можно было бы вычислить, если бы сначала каким-либо образом найти амплитуду рассеяния на одной частице мишени $T_{\alpha}(E_i)$, а затем найти решение системы интегральных уравнений (5.20), подставить его в формулу (5.21).

Но как найти амплитуду рассеяния на одной частице мишени? Разлагая формулу (5.14) в ряд, получаем

$$T_{\alpha}(E_i) = V_{\alpha} + V_{\alpha} G_0(E_i) V_{\alpha} + V_{\alpha} G_0(E_i) V_{\alpha} G_0(E_i) V_{\alpha} + \dots \quad (5.23)$$

Согласно определениям (5.1) и (5.7), входящая сюда величина $G_0(E_i)$ дается выражением

$$G_0(E_i) = \frac{1}{E_i - (H_n + H_A) + i\varepsilon}. \quad (5.24)$$

Примем для этой величины следующее приближение. Если падающая частица сталкивается с одной из частиц мишени, то изменение состояния мишени как целого мало и им можно пренебречь. Тогда H_A в знаменателе формулы (5.24) можно заменить собственным значением энергии начального состояния E_i^A . Итак, для G_0 приближенно принимаем

$$G_0(E_i) \approx G_n(\mathcal{E}_i) = \frac{1}{E_i - (H_n + E_i^A) + i\varepsilon} = \frac{1}{\mathcal{E}_i - H_n + i\varepsilon}. \quad (5.25)$$

Такое приближение называют *импульсным приближением*. Пользуясь тем обстоятельством, что $\exp(-ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar)$ есть оператор сдвига \mathbf{r}_n на величину $-\mathbf{r}_\alpha$, перепишем потенциал $V_\alpha = V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_\alpha)$, входящий в выражение (5.23), в виде

$$V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_\alpha) = \exp(-ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar) V(\mathbf{r}_n) \exp(+ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar), \quad (5.26)$$

где p_n — оператор импульса падающей частицы. Вычислим ряд (5.23), учитывая приближение (5.25) и соотношение (5.26):

$$\begin{aligned} T_\alpha(E_i) &\approx \exp(-ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar) [V(\mathbf{r}_n) + V(\mathbf{r}_n) G_n(\mathcal{E}_i) V(\mathbf{r}_n) + \\ &+ V(\mathbf{r}_n) G_n(\mathcal{E}_i) V(\mathbf{r}_n) G_n(\mathcal{E}_i) V(\mathbf{r}_n) + \dots] \exp(ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar) = \\ &= \exp(-ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar) t(\mathcal{E}_i) \exp(ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Здесь

$$t(\mathcal{E}_i) = V(\mathbf{r}_n) + V(\mathbf{r}_n) G_n(\mathcal{E}_i) t(\mathcal{E}_i). \quad (5.28)$$

В полученное интегральное уравнение входят только величины, зависящие от переменной \mathbf{r}_n падающей частицы, и не входят величины, зависящие от координат частиц мишени, а значит, оно совпадает с рассмотренным выше уравнением рассеяния одной частицы на потенциале $V(\mathbf{r}_n)$. Решая его и подставляя решение в формулу (5.27), найдем приближенное выражение для $T_\alpha(E_i)$. Для матричного элемента $T_\alpha(E_i)$ (5.27) получим

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{k}_f, A_f) | T_\alpha(E_i) | \phi(\mathbf{k}_i, A_i) \rangle &= \\ &= \langle \phi(\mathbf{k}_f, A_f) | \exp(-ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar) t(\mathcal{E}_i) \times \\ &\times \exp(ip_n \cdot \mathbf{r}_\alpha/\hbar) | \phi(\mathbf{k}_i, A_i) \rangle = \langle \phi(\mathbf{k}_f) | t(\mathcal{E}_i) | \phi(\mathbf{k}_i) \rangle \times \\ &\times \langle \phi(A_f) | \exp(-ik_f \cdot \mathbf{r}_\alpha) \exp(ik_i \cdot \mathbf{r}_\alpha) | \phi(A_i) \rangle. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Если энергия падающей частицы мала, то, пользуясь формулой (3.6) из гл. 2, а также формулами (2.17) и (6.38) из гл. 3, можно приближенно написать

$$\langle \phi(\mathbf{k}_f) | t(\mathcal{E}_i) | \phi(\mathbf{k}_i) \rangle \approx \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m} \alpha, \quad (5.30)$$

где α — длина рассеяния падающей частицы потенциалом $V(\mathbf{r}_n)$. Подставляя выражение (5.30) в форму-

лу (5.29), получаем следующее выражение для матричного элемента $T_\alpha(E_i)$:

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{k}_f, A_f) | T_\alpha(E_i) | \phi(\mathbf{k}_i, A_i) \rangle &\approx \\ &\approx \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m} \alpha \langle \phi(A_f) | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha) | \phi(A_i) \rangle, \end{aligned} \quad (5.31)$$

где

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \quad (5.32)$$

есть изменение импульса падающей частицы при рассеянии.

А. Рассеяние медленных нейтронов в веществе

Хорошо известно, что для исследования атомной структуры вещества, состоящего из огромного числа атомов, пользуются дифракцией рентгеновских лучей, рассеиваемых внутренними электронами атомов. Но интенсивность такого рассеяния на атомах с малым числом электронов, например атомах водорода, мала, и определить положение таких атомов трудно. В то же время медленные нейтроны от ядерного реактора, длина волны которых одного порядка величины с длиной волны рентгеновских лучей, совершенно не взаимодействуя с электронами, сильно взаимодействуют с атомными ядрами. Следовательно, медленные нейтроны удобны для определения положений атомов с малым атомным номером. Применим изложенную выше теорию к задаче о рассеянии нейтронов в веществе.

Итак, пусть падающая частица — медленный нейтрон. В разложении (5.16) второй и следующие члены правой части учитывают многократное рассеяние нейтронов. Но если толщина мишени невелика, то эффектом многократного рассеяния можно пренебречь. Поэтому рассмотрим только первый член правой части формулы (5.16). Подставляя в него выражение (5.31), получаем

$$\begin{aligned} \langle \phi(\mathbf{k}_f, A_f) | T(E_i) | \phi(\mathbf{k}_i, A_i) \rangle &\approx \\ &\approx \left\langle \phi(\mathbf{k}_f, A_f) \left| \sum_{\alpha} T_{\alpha}(E_i) \right| \phi(\mathbf{k}_i, A_i) \right\rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m} \alpha \sum_{\alpha} \langle \phi(A_f) | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}) | \phi(A_i) \rangle. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Согласно результату, полученному нами в § 2, п. «Д», дифференциальное сечение, приходящееся на единичный интервал энергии рассеянного нейтрона, выразится формулой

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\mathcal{E}_f} = \left[\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \right]^2 \frac{k_f}{k_i} \times \\ \times \sum_{A_f, A_i} \delta(E_f - E_i) P_i |\langle \phi(\mathbf{k}_f, A_f) | T(E_i) | \phi(\mathbf{k}_i, A_i) \rangle|^2, \quad (5.34)$$

в которой P_i — статистический вес распределения начальных состояний мишени. Подставляя формулу (5.33) в (5.34) и записывая δ -функцию в формуле (5.34) в виде интеграла Фурье, получаем

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\mathcal{E}_f} = \frac{k_f}{k_i} \alpha^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \times \\ \times \sum_{A_i A_f} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[i(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i)t/\hbar] \exp[i(E_f^A - E_i^A)t/\hbar] \times \\ \times \sum_{\alpha, \beta} P_i \langle \phi(A_i) | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha) | \phi(A_f) \rangle \times \\ \times \langle \phi(A_f) | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\beta) | \phi(A_i) \rangle.$$

Это выражение преобразуем следующим образом:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\mathcal{E}_f} = \frac{k_f}{k_i} \alpha^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \times \\ \times \sum_{\alpha, \beta} \sum_{A_i, A_f} P_i \langle \phi(A_i) | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha) | \phi(A_f) \rangle \times \\ \times \langle \phi(A_f) | \exp(iH_A t/\hbar) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\beta) \exp(-iH_A t/\hbar) | \phi(A_i) \rangle = \\ = \frac{k_f}{k_i} \alpha^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \times \\ \times \sum_{\alpha, \beta} \sum_{A_i} P_i \langle \phi(A_i) | \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha(0)] \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\beta(t)] | \phi(A_i) \rangle =$$

$$= \frac{k_f}{k_i} \alpha^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \times \\ \times \sum_{\alpha, \beta} \langle\langle \exp[-ik \cdot r_{\alpha}(0)] \exp[ik \cdot r_{\beta}(t)] \rangle\rangle. \quad (5.35)$$

При выводе формулы (5.35) нужно воспользоваться соотношением полноты волновых функций мишени

$$\sum_f |\phi(A_f)\rangle \langle\phi(A_f)| = 1$$

и принять, что при рассеянии энергия нейтрона изменяется на величину

$$\hbar\omega = \mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f. \quad (5.36)$$

Величина $r_{\beta}(t)$ в формуле (5.35) — гейзенберговский оператор:

$$r_{\beta}(t) = \exp(iH_A t/\hbar) r_{\beta} \exp(-iH_A t/\hbar), \quad (5.37)$$

а $r_{\alpha}(0) = r_{\alpha}$. Гейзенберговские операторы выражают механические свойства мишени. Наконец, двойные угловые скобки $\langle\langle \rangle\rangle$ в формуле (5.35) обозначают статистическое усреднение по мишени.

Формулу (5.35) можно переписать в виде

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\mathcal{E}_f} = N\alpha^2 \frac{k_f}{k_i} S(k, \omega), \quad (5.38)$$

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \times \\ \times \sum_{\alpha, \beta} \langle\langle \exp\{-ik \cdot r_{\alpha}(0)\} \exp\{ik \cdot r_{\beta}(t)\} \rangle\rangle. \quad (5.39)$$

Выражение (5.38) называют *формулой Ван-Хова*, а величину $S(k, \omega)$ — *динамическим структурным фактором*. Измеряя экспериментально дифференциальное сечение, входящее в правую часть формулы (5.38), можно находить величину $S(k, \omega)$ и тем самым выяснить структуру пространственного и временного распределения атомов в веществе мишени. Поэтому формула (5.38) — основа метода исследования атомной

структуры тел по рассеянию нейтронов. Выражение (5.39) можно переписать иначе:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \int d^3\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) G(\mathbf{r}, t), \quad (5.40)$$

$$G(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, \beta} \int d^3\mathbf{r}' \langle\langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{r}_\alpha(0)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_\beta(t)) \rangle\rangle. \quad (5.41)$$

Величину $G(\mathbf{r}, t)$ называют *пространственно-временной парнокорреляционной функцией*. Заметим, что $G(\mathbf{r}, t)$ — не действительная величина, так как операторы $\mathbf{r}_\alpha(0)$ и $\mathbf{r}_\beta(t)$ в формуле (5.41), вообще говоря, не коммутируют. Но если мишень можно считать классической системой, то $\mathbf{r}_\alpha(0)$ и $\mathbf{r}_\beta(t)$ будут c -числами, и тогда величина

$$G^{(c)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, \beta} \langle\langle \delta(\mathbf{r} - [\mathbf{r}_\beta^{(c)}(t) - \mathbf{r}_\alpha^{(c)}(0)]) \rangle\rangle_c \quad (5.42)$$

будет действительной. Она равна вероятности того, что расстояние между положением атома в момент $t = 0$ и его положением в момент t есть \mathbf{r} . Выражение (5.41) можно разбить на два слагаемых:

$$G(\mathbf{r}, t) = G_s(\mathbf{r}, t) + G_d(\mathbf{r}, t), \quad (5.43)$$

где

$$G_s(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \langle\langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{r}_\alpha(0)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_\alpha(t)) \rangle\rangle, \quad (5.44)$$

$$G_d(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha \neq \beta} \langle\langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{r}_\alpha(0)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_\beta(t)) \rangle\rangle. \quad (5.45)$$

Величину $G_s(\mathbf{r}, t)$ называют *автокорреляционной*, а величину $G_d(\mathbf{r}, t)$ — *кросс-корреляционной функцией*. Первая учитывает корреляцию в положениях одной и той же частицы в разные моменты времени, а вторая — корреляцию пар разных частиц. Рассмотрим для примера идеальный газ из N атомов и рассчитаем

для него сечение рассеяния медленных нейтронов. В идеальном газе все частицы движутся независимо друг от друга (парная корреляция между частицами отсутствует), а поэтому в формуле (5.43) можно ограничиться вычислением автокорреляционной функции. В рассматриваемом случае формула (5.39) дает

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N} \int dt \exp(-i\omega t) \times \\ \times \sum_{\alpha} \langle\langle \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}(0)\} \exp\{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}(t)\} \rangle\rangle. \quad (5.46)$$

Поскольку атомы газа движутся свободно, решение гейзенберговского уравнения движения

$$\frac{d\mathbf{r}_{\alpha}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_A, \mathbf{r}_{\alpha}(t)]$$

имеет вид

$$\mathbf{r}_{\alpha}(t) = \mathbf{r}_{\alpha}(0) + \frac{1}{M} \mathbf{p}_{\alpha}(0) t, \quad (5.47)$$

где M — масса мишени, а $\mathbf{p}_{\alpha}(0)$ — оператор импульса частицы в момент $t=0$. Если коммутатор двух произвольных операторов A и B есть c -число, то справедливо равенство

$$\exp(A) \exp(B) = \exp\left\{A + B + \frac{1}{2}[A, B]\right\}. \quad (5.48)$$

Согласно формуле (5.47), в нашем случае

$$[\mathbf{r}_{\alpha}(0), \mathbf{r}_{\alpha}(t)] = \frac{t}{M} [\mathbf{r}(0), \mathbf{p}_{\alpha}(0)] = \frac{i\hbar}{M} t, \quad (5.49)$$

ввиду чего к произведению экспонент в формуле (5.46) можно применить соотношение (5.48):

$$\exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}(0)\} \exp\{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}(t)\} = \\ = \exp\left\{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{\alpha}(0) - \mathbf{r}_{\alpha}(t)) + \frac{1}{2}[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}(0), \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}(t)]\right\} = \\ = \exp\{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{\alpha}(0) t/M + i\hbar \mathbf{k}^2 t/2M\}. \quad (5.50)$$

Подставив полученный результат в формулу (5.46), приведем его к виду

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N} \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle\langle \exp\{-i(\omega - \hbar\mathbf{k}^2/2M + \mathbf{p}_{\alpha}(0) \cdot \mathbf{k}/M)t\}\rangle\rangle =$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{\int d^3 p_{\alpha} \exp(-\beta p_{\alpha}^2/2M) \langle\phi(\mathbf{p}_{\alpha}) | \delta(\omega - \hbar\mathbf{k}^2/2M - \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{k}/M) | \phi(\mathbf{p}_{\alpha})\rangle}{\int d^3 p_{\alpha} \exp(-\beta p_{\alpha}^2/2M)}, \quad (5.51)$$

где $\beta = (kT)^{-1}$, T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана и учтена тождественность всех N атомов газа. Интеграл (5.51) легко берется, и результат имеет вид

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \sqrt{\frac{\beta M}{2\pi\hbar^2 k^2}} \exp\left\{-\frac{\beta M}{2k^2} \left(\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2\right\}. \quad (5.52)$$

Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния дается формулой

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\mathcal{E}_f} = N\alpha^2 \frac{k_f}{k_i} \sqrt{\frac{\beta M}{2\pi\hbar^2 k^2}} \exp\left\{-\frac{\beta M}{2k^2} \left(\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2\right\}. \quad (5.53)$$

Б. Оптическая модель

Рассматривая столкновения нейтронов с ядрами, действие ядра на нейтрон можно приближенно описать потенциалом, отличным от нуля в области, занимаемой ядром. Такую модель ядра называют *оптической моделью*, а соответствующий потенциал — *оптическим потенциалом*. Дадим вывод оптического потенциала, рассматривая ядро как систему многих тел (нуклонов) и основываясь на представлении о многократном упругом рассеянии нейтронов внутренними нуклонами ядра.

Для решения задачи о многократном рассеянии нужно, решив систему N уравнений (5.20), найти

$\Omega_\alpha(E_i)$ и подставить полученный результат в формулу (5.21). Мы применим здесь приближенный метод. Перепишем формулу (5.22) для $U(E_i)$ в виде

$$U(E_i) = 1 + G_0(E_i) T_\alpha(E_i) \Omega_\alpha(E_i) + \\ + G_0(E_i) \sum_{\beta \neq \alpha} T_\beta(E_i) \Omega_\beta(E_i). \quad (5.54)$$

Учитывая, что число нуклонов внутри ядра велико, пренебрежем вторым членом в выражении (5.54) по сравнению со всей суммой при $\beta \neq \alpha$. Такое приближение называют *оптическим приближением*. В оптическом приближении можно считать, что величина $U(E_i)$ [формула (5.54)] совпадает с величиной $\Omega_\alpha(E_i)$ [формула (5.20)]:

$$\Omega_\alpha(E_i) \approx U(E_i). \quad (5.55)$$

Тогда формулу (5.22) можно записать в виде

$$U(E_i) = 1 + G_0(E_i) \left[\sum_{\text{все } \alpha} T_\alpha(E_i) \right] U(E_i). \quad (5.56)$$

Сравнивая полученное уравнение с выражением (5.17), переписанным в виде интегрального уравнения

$$U(E_i) = 1 + G_0(E_i) V U(E_i), \quad (5.57)$$

получим для оптического потенциала $V_{\text{опт}}$ выражение

$$V_{\text{опт}} = \sum_{\text{все } \alpha} T_\alpha(E_i). \quad (5.58)$$

Если энергия падающего нейтрона мала, то с учетом соотношения (5.30) имеем

$$\langle \phi(\mathbf{k}_f) | t(\mathcal{E}_i) | \phi(\mathbf{k}_i) \rangle = \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m} \alpha. \quad (5.59)$$

Пользуясь формулами (5.5), представим соотношение (5.59) в виде

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{r}_n \exp\{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}_n\} t(\mathcal{E}_i) = \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m} \alpha, \quad (5.60)$$

откуда вытекает выражение для $t(\mathcal{E}_i)$:

$$t(\mathcal{E}_i) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \alpha \delta^3(\mathbf{r}_n). \quad (5.61)$$

Подставляя его в формулу (5.27), получаем

$$\begin{aligned} T_{\alpha}(E_i) &= \exp(-i\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r}_{\alpha}/\hbar) t(\mathcal{E}_i) \exp(i\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r}_{\alpha}/\hbar) = \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \alpha \exp(-i\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r}_{\alpha}/\hbar) \delta^3(\mathbf{r}_n) \exp(i\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r}_{\alpha}/\hbar) = \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \alpha \delta^3(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{\alpha}). \end{aligned} \quad (5.62)$$

Тогда, согласно формуле (5.58),

$$V_{\text{опт}}(\mathbf{r}_n) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \alpha \sum_{\alpha=1}^N \delta^3(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{\alpha}). \quad (5.63)$$

Пользуясь выражением

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \quad (5.64)$$

для распределения плотности внутри ядра, придем к окончательной формуле для оптического потенциала:

$$V_{\text{опт}}(\mathbf{r}_n) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} N\alpha\rho(\mathbf{r}_n). \quad (5.65)$$

Согласно этой формуле, ядро воспринимается нейтроном как потенциал, отличный от нуля в пределах ядра. В принятом нами приближении длина рассеяния (5.59) действительна, но если энергия нейтрона несколько возрастет, то матричный элемент $t(\mathcal{E}_i)$, вообще говоря, становится комплексным. Тогда оптический потенциал приобретает мнимую часть, описывающую процессы поглощения (ядерные реакции).

§ 6. Резонансное рассеяние

В гл. 3, § 6 мы рассмотрели резонансное рассеяние на прямоугольной потенциальной яме в случае S -волны. Рассмотрим теперь несколько более общий подход к этому явлению. Гамильтониан системы запишем в виде

$$H = H_0 + V, \quad (6.1)$$

где H_0 — сумма гамильтонианов падающей частицы и мишени, а V — потенциал взаимодействия между ними. Тогда начальное состояние дается собственными функциями гамильтониана H_0 :

$$H_0 \Phi(\mathbf{k}_i, \alpha_i) = E_i \Phi(\mathbf{k}_i, \alpha_i), \quad (6.2)$$

имеющими вид

$$\Phi(\mathbf{k}_i, \alpha_i) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \varphi^B(\alpha_i), \quad (6.3)$$

где $\varphi^B(\alpha_i)$ — связанное состояние мишени. Кроме состояний гамильтониана H_0 вида (6.3), могут существовать еще состояния $\Phi(0, \alpha_r)$, в которых падающая частица поглощена мишенью. Предположим, что эти состояния удовлетворяют уравнению

$$H_0 \Phi(0, \alpha_r) = E_r \Phi(0, \alpha_r), \quad (6.4)$$

а собственные значения энергии в них — положительные дискретные величины. Эти состояния должны быть ортогональны состояниям (6.3):

$$\langle \Phi(\mathbf{k}_n, \alpha_n) | \Phi(0, \alpha_r) \rangle = 0. \quad (6.5)$$

При рассеянии на потенциальной яме состояниям (6.4) соответствовали метастабильные состояния и соотношение ортогональности не выполнялось строго. В случае же падающих частиц, которые могут рождаться и аннигилировать, например фотонов или π -мезонов, соотношение (6.5) точное. Плоскую волну в формуле (6.3) будем интерпретировать как волновую функцию падающей частицы, волновую функцию связанного состояния $\varphi^B(\alpha_i)$ — как волновую функцию внутренних электронов атомов, а волновую функцию $\Phi(0, \alpha_r)$ — как волновую функцию электронов, перешедших в возбужденное состояние после поглощения фотона.

Согласно формулам (5.6) и (5.7) предыдущего параграфа, можно написать

$$T(E_i) = V + VG_0(E_i)T(E_i), \quad (6.6)$$

$$G_0(E_i) = \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon}. \quad (6.7)$$

Формальное решение уравнения (6.6) имеет вид

$$T(E_i) = \frac{1}{1 - VG_0(E_i)} V. \quad (6.8)$$

Подставив его в правую часть уравнения (6.6), получим

$$T(E_i) = V + VG_0(E_i) \frac{1}{1 - VG_0(E_i)} V. \quad (6.9)$$

Сделаем предположения о величине матричных элементов взаимодействия V . Будем считать, что матричный элемент

$$\langle r | V | k_n, \alpha_n \rangle \equiv \langle \Phi(0, \alpha_r) | V | \Phi(k_n, \alpha_n) \rangle$$

есть величина первого порядка малости по константе взаимодействия, а матричный элемент

$$\langle k_m, \alpha_m | V | k_n, \alpha_n \rangle \equiv \langle \Phi(k_m, \alpha_m) | V | \Phi(k_n, \alpha_n) \rangle$$

есть величина второго порядка малости. Примем также, что

$$\langle r | V | r \rangle \equiv \langle \Phi(0, \alpha_r) | V | \Phi(0, \alpha_r) \rangle = 0. \quad (6.10)$$

Высказанные предположения равносильны требованию, чтобы члены в гамильтониане взаимодействия V имели первый порядок по константе связи, если они содержат один оператор рождения и поглощения фотона, и второй порядок, если они содержат два таких оператора.

Исходя из сделанных предположений, вычислим приближенно матричный элемент (6.9). Предполагая, что существует только одно состояние $\Phi(0, \alpha_r)$, удовлетворяющее уравнению (6.4), напомним приближенно

$$\begin{aligned} \langle k_f, \alpha_f | T(E_i) | k_i, \alpha_i \rangle &\approx \langle k_f, \alpha_f | V(E_i) | k_i, \alpha_i \rangle + \\ &+ \langle k_f, \alpha_f | V | r \rangle \frac{1}{E_i - E_r + i\epsilon} \langle r | \frac{1}{1 - VG_0(E_i)} | r \rangle \langle r | V | k_i, \alpha_i \rangle. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Кроме того, примем следующее приближенное выражение:

$$\begin{aligned} \langle r | \frac{1}{1 - VG_0(E_i)} | r \rangle &= \\ &= \langle r | [1 + VG_0(E_i) + VG_0(E_i)VG_0(E_i) + \dots] | r \rangle \approx 1 + \\ &+ \langle r | VG_0(E_i) V | r \rangle \frac{1}{E_i - E_r + i\varepsilon} + \langle r | VG_0(E_i) V | r \rangle \times \\ &\times \frac{1}{E_i - E_r + i\varepsilon} \langle r | VG_0(E_i) V | r \rangle \frac{1}{E_i - E_r + i\varepsilon} + \dots, \end{aligned} \quad (6.12)$$

при выводе которого нужно воспользоваться тем, что, согласно условию (6.10), вклад членов нечетного порядка по V равен нулю. Ряд (6.12) можно просуммировать:

$$\begin{aligned} \langle r | \frac{1}{1 - VG_0(E_i)} | r \rangle &\approx \\ &\approx \left[1 - \frac{1}{E_i - E_r + i\varepsilon} \langle r | VG_0(E_i) V | r \rangle \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Подставив выражение (6.13) в формулу (6.11), получим

$$\begin{aligned} \langle k_f, \alpha_f | T(E_i) | k_i, \alpha_i \rangle &= \langle k_f, \alpha_f | V | k_i, \alpha_i \rangle + \\ &+ \frac{\langle k_f, \alpha_f | V | r \rangle \langle r | V | k_i, \alpha_i \rangle}{E_i - E_r + i\varepsilon - \langle r | VG_0(E_i) V | r \rangle}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Если энергия начального состояния E_i очень близка к энергии резонанса E_r , то можно принять

$$\langle r | VG_0(E_i) V | r \rangle \approx \langle r | VG_0(E_r) V | r \rangle. \quad (6.15)$$

Пользуясь соотношением ¹⁾

$$\frac{1}{x + i\varepsilon} = P \frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \quad (6.16)$$

¹⁾ Справедливость соотношения (6.16) можно показать следующим образом. Преобразуем левую часть равенства (6.16):

$$\frac{1}{x + i\varepsilon} = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} - \frac{i\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}.$$

Первый член правой части последнего равенства дает

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} = \begin{cases} \frac{1}{x} & \text{при } x \neq 0, \\ 0 & \text{при } x = 0. \end{cases}$$

Следовательно, для функции, не имеющей особенностей в начале

преобразуем выражение (6.15) к виду

$$\begin{aligned} \langle r | VG_0(E_r) V | r \rangle &= \langle r | V \frac{1}{E_r - H_0 + i\varepsilon} V | r \rangle = \\ &= \langle r | VP \frac{1}{E_r - H_0} V | r \rangle - i\pi \langle r | V \delta(E_r - H_0) V | r \rangle. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Символ P в формулах (6.16) и (6.17) означает, что интеграл берется в смысле главного значения Коши. Вводя в формулу (6.17) полную систему функций $\{\Phi(\mathbf{k}_n, \alpha_n), \Phi(0, \alpha_r)\}$ и принимая во внимание условие (6.10), получаем

$$\begin{aligned} \langle r | VG_0(E_r) V | r \rangle &= P \sum_n \frac{|\mathbf{k}_n, \alpha_n | V | r \rangle|^2}{E_r - E_n} - \\ &- i\pi \sum_n \delta(E_r - E_n) |\langle \mathbf{k}_n, \alpha_n | V | r \rangle|^2. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Первый член в правой части этого равенства дает сдвиг собственного значения энергии резонансного состояния за счет взаимодействия V [на языке кванто-

ординат, имеем

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) dx = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx.$$

Предел этого выражения — интеграл Коши в смысле главного значения. Второй член правой части полученного выше равенства в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ дает

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \begin{cases} 0 & \text{при } x \neq 0, \\ \frac{1}{\varepsilon} = \infty & \text{при } x = 0. \end{cases}$$

Эта величина расходится в начале координат, а в остальных точках равна нулю, т. е. имеет свойства δ -функции. Следовательно,

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) dx &= f(0) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = \\ &= \pi f(0) = \pi \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx. \end{aligned}$$

вой теории поля это — собственная энергия электрона в состоянии $\Phi(0, \alpha_r)$. Поэтому

$$\Delta E_r \equiv P \sum_n \frac{|\langle k_n \alpha_n | V | r \rangle|^2}{E_r - E_n}. \quad (6.19)$$

Второе слагаемое в выражении (6.18) можно связать с суммой вероятностей перехода (3.1) по всем возможным конечным состояниям:

$$\sum_n w_{n,r} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_n \delta(E_n - E_r) |\langle k_n, \alpha_n | V | r \rangle|^2. \quad (6.20)$$

Иначе говоря, (6.20) — полная вероятность испускания в единицу времени частицы с импульсом k_n при распаде резонансного состояния $\Phi(0, \alpha_r)$, вычисленная в борновском приближении. Поэтому, положив

$$\Gamma_r = \hbar \sum_n w_{n,r}, \quad (6.21)$$

выражение (6.18) можно переписать в виде

$$\langle r | V G_0(E_r) V | r \rangle = \Delta E_r - \frac{i}{2} \Gamma_r. \quad (6.22)$$

Подставляя этот матричный элемент в формулу (6.14), получаем

$$\begin{aligned} \langle k_f \alpha_f | T(E_i) | k_i \alpha_i \rangle &= \\ &= \langle k_f, \alpha_f | V | k_i \alpha_i \rangle + \frac{\langle k_f, \alpha_f | V | r \rangle \langle r | V | k_i, \alpha_i \rangle}{E_i - (E_r + \Delta E_r) + i\Gamma_r/2}, \end{aligned} \quad (6.23)$$

с учетом формулы (2.80) придем к следующему выражению для дифференциального сечения:

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{k_f}{k_i} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} |\langle k_f, \alpha_f | V | k_i, \alpha_i \rangle + \\ &+ \frac{\langle k_f, \alpha_f | V | r \rangle \langle r | V | k_i, \alpha_i \rangle}{E_i - (E_r + \Delta E_r) + i\Gamma_r/2}|^2. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Сравнивая полученный результат с формулой (6.59) из гл. 3, видим, что первый член под знаком абсолютного значения учитывает потенциальное, а второй — резонансное рассеяние.

Теория рассеяния в системе трех тел

§ 1. Проблемы теории рассеяния с перегруппировкой частиц

В теории, изложенной в гл. 4, мы считали, что разбиение полного гамильтониана системы частиц на два слагаемых

$$H = H_0 + V \quad (1.1)$$

не изменяется в ходе рассеяния: от момента $t = -\infty$ до момента $t = +\infty$ взаимодействие все время равно V , и в моменты $t = \pm\infty$ система оказывается в собственных состояниях $\Phi_n^{(L)}$ одного и того же гамильтониана H_0 , образующих полную ортонормированную систему функций. Но, например, в случае системы трех различных частиц, полный гамильтониан которой записывается в виде

$$H = K_1 + K_2 + K_3 + V_{12} + V_{23} + V_{31}, \quad (1.2)$$

ситуация усложняется и простые соображения, высказанные выше, становятся непригодными. В формуле (1.2) K_1, K_2 — операторы кинетической энергии трех частиц, а $V_{i,j}$ — потенциалы взаимодействия частицы i с частицей j .

Пусть в начальном состоянии первая и вторая частицы, взаимодействующие с потенциалом V_{12} , образуют связанное состояние и с ним сталкивается третья частица. Тогда полный гамильтониан нужно разбить по схеме

$$H = [(K_1 + K_2 + V_{12}) + K_3] + [V_{23} + V_{31}] \quad (1.3)$$

и начальное состояние выразится собственными функциями $\Phi_i^{(L)}$, удовлетворяющими уравнению

$$[(K_1 + K_2 + V_{12}) + K_3] \Phi_i^{(L)} = E_i \Phi_i^{(L)}, \quad (1.4)$$

Далее, пусть в конечном состоянии частица 1 свободна, а частицы 2 и 3, взаимодействующие с потенциалом V_{23} , объединены в связанное состояние. Тогда в конечном состоянии полный гамильтониан разбивается по схеме

$$H = [K_1 + (K_2 + K_3 + V_{23})] + [V_{12} + V_{31}] \quad (1.5)$$

и волновые функции конечного состояния $\Phi_f^{(L)}$ удовлетворяют уравнению

$$[K_1 + (K_2 + K_3 + V_{23})] \Phi_f^{(L)} = E_f \Phi_f^{(L)}. \quad (1.6)$$

Такое рассеяние, в ходе которого изменяется гамильтониан, определяющий состояние, называют *рассеянием с перегруппировкой частиц*. В случае системы, образованной более чем тремя частицами, гамильтониан H можно разбить разными способами, например такими:

$$H = H_a + V_a = H_b + V_b = H_c + V_c = \dots \quad (1.7)$$

Соответственно этому начальное и конечное состояния могут определяться как собственные состояния гамильтонианов H_a, H_b, H_c и т. д.

Как приспособить теорию гл. 4 к описанию подобных ситуаций? Посмотрим, в чем суть теории, применявшейся нами до сих пор. Пусть начальное состояние $\Phi_a^{(L)}$ — собственное состояние гамильтониана H_a :

$$H_a \Phi_a^{(L)} = E_a \Phi_a^{(L)}, \quad (1.8)$$

а дифференциальное уравнение Шредингера полной системы имеет вид

$$(E_a - H_a) \Psi_a^{(+)} = V_a \Psi_a^{(+)}. \quad (1.9)$$

Соответствующее интегральное уравнение, учитывающее расходящуюся волну в асимптотике, имеет вид

$$\Psi_a^{(+)} = \Phi_a^{(L)} + \frac{1}{E_a - H_a + i\varepsilon} V_a \Psi_a^{(+)}. \quad (1.10)$$

Аналогично, если конечное состояние $\Phi_f^{(L)}$ — решение уравнения

$$H_b \Phi_b^{(L)} = E_b \Phi_b^{(L)}, \quad (1.11)$$

то можно написать

$$\Psi_b^{(-)} = \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_b - H_b - i\varepsilon} V_b \Psi_b^{(-)}. \quad (1.12)$$

С учетом формулы (2.28) из гл. 2 формальные решения интегральных уравнений (1.10) и (1.12) принимают вид

$$\Psi_a^{(+)} = \Phi_a^{(L)} + \frac{1}{E_a - H + i\varepsilon} V_a \Phi_a^{(L)}, \quad (1.13)$$

$$\Psi_b^{(-)} = \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_b - H - i\varepsilon} V_b \Phi_b^{(L)}. \quad (1.14)$$

Заменяя в формуле (1.13) индекс a индексом b и вычитая получившееся выражение из (1.14), получаем

$$\begin{aligned} \Psi_b^{(-)} - \Psi_b^{(+)} &= \left[\frac{1}{E_b - H - i\varepsilon} - \frac{1}{E_b - H + i\varepsilon} \right] V_b \Phi_b^{(L)} = \\ &= \frac{2i\varepsilon}{(E_b - H)^2 + \varepsilon^2} V_b \Phi_b^{(L)} = 2\pi i \delta(E_b - H) V_b \Phi_b^{(L)}. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Обобщая формулу (2.62) гл. 4 для S -матрицы, введем S -матрицу рассеяния с перегруппировкой частиц:

$$S_{b,a} \equiv \langle \Psi_b^{(-)} | \Psi_a^{(+)} \rangle. \quad (1.16)$$

Переписав выражение (1.16) с учетом формулы (1.15) и исключив $\Psi_b^{(-)}$, придем к обобщению формулы (2.61) из гл. 4:

$$\begin{aligned} S_{b,a} &= \langle \Psi_b^{(+)} + 2\pi i \delta(E_b - H) V_b \Phi_b^{(L)} | \Psi_a^{(+)} \rangle = \\ &= \langle \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle - 2\pi i \langle \Phi_b^{(L)} | V_b \delta(E_b - H) | \Psi_a^{(+)} \rangle = \\ &= \delta_{a,b} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) \langle \Phi_b^{(L)} | V_b | \Psi_a^{(+)} \rangle. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Если же заменить в формуле (1.15) индекс b индексом a и исключить из выражения (1.16) $\Psi_a^{(+)}$, то мы придем к выражению

$$S_{b,a} = \delta_{a,b} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) \langle \Psi_b^{(-)} | V_a | \Phi_a^{(L)} \rangle. \quad (1.18)$$

К этому и сводится сущность применявшейся нами до сих пор теории. Рассмотрим ее затруднения. Первое затруднение такое. В формуле (1.17) принято, что

$$\langle \Psi_b^{(\pm)} | \Psi_a^{(\pm)} \rangle = \delta_{b,a}. \quad (1.19)$$

Верно ли это соотношение нормированности? В гл. 4 [формула (2.44)] доказано, что в пределе при $L \rightarrow \infty$ выполняется соотношение

$$\langle \Psi_i^{(\pm)} | \Psi_j^{(\pm)} \rangle = \langle \Phi_i^{(L)} | \Phi_j^{(L)} \rangle = \delta_{i, j}, \quad (1.20)$$

на основе которого там доказана унитарность S -матрицы и оптическая теорема. Но в гл. 4 обе функции $\Phi_i^{(L)}$ и $\Phi_j^{(L)}$ были собственными функциями гамильтониана H_0 , а потому второе равенство формулы (1.20) было естественным. Здесь же $\Phi_a^{(L)}$ — собственная функция гамильтониана H_a , а $\Phi_b^{(L)}$ — собственная функция гамильтониана H_b . Вообще говоря, собственные функции разных гамильтонианов не ортогональны друг другу. Таким образом, в отличие от формулы (1.20) в данном случае, вообще говоря,

$$\langle \Phi_b^{(L)} | \Phi_a^{(L)} \rangle \neq \delta_{b, a}. \quad (1.21)$$

Но, может быть, все-таки есть какие-то основания для соотношения (1.19)? С физической точки зрения оно представляется верным. В самом деле, пусть, например, в одном конечном состоянии $\Phi_a^{(L)}$ частица 1 свободна, а частица 2 и 3 связаны, а в другом конечном состоянии $\Phi_a^{(L)}$ все три частицы свободны (не взаимодействуют друг с другом). Эти два конечных состояния можно различить экспериментально, а следовательно, они должны быть ортогональны друг другу. Нельзя ли поэтому доказать соотношение (1.19), применив без изменений метод гл. 4, § 2, п. «В»? Формулу (1.13) можно переписать в виде выражения

$$\begin{aligned} \Psi_a^{(+)} &= \left[1 + \frac{1}{E_a - H + i\varepsilon} (H - H_a) \right] \Phi_a^{(L)} = \\ &= \frac{i\varepsilon}{E_a - H + i\varepsilon} \Phi_a^{(L)}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

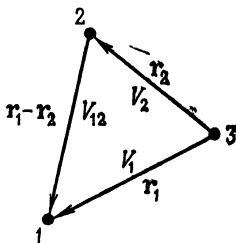
пользуясь которым и действуя так же, как при выводе формулы (2.36) в гл. 4, получаем

$$\langle \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle = \frac{i\varepsilon}{E_a - E_b + i2\varepsilon} [\langle \Psi_b^{(+)} | \Phi_a^{(L)} \rangle + \langle \Phi_b^{(L)} | \Psi_a^{(+)} \rangle]. \quad (1.23)$$

Подставив в правую часть этого равенства решение уравнения Липпмана — Швингера (1.13), придем к выражению

$$\begin{aligned} \langle \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle = & \frac{i\epsilon}{E_a - E_b + 2i\epsilon} \left\{ 2 \langle \Phi_b^{(L)} | \Phi_a^{(L)} \rangle + \right. \\ & + \langle \Phi_b^{(L)} | \frac{1}{E_a - H + i\epsilon} V_a | \Phi_a^{(L)} \rangle + \\ & \left. + \langle \Phi_b^{(L)} | V_b \frac{1}{E_b - H - i\epsilon} | \Phi_a^{(L)} \rangle \right\}. \quad (1.24) \end{aligned}$$

Наиболее существенный пункт доказательства ортонормированности состояний рассеяния в гл. 4, § 2,



Фиг. 39. Система трех тел, в которой третья частица неподвижна.

п. «В» состоял в том, что остальные члены правой части были более высокого порядка малости по L^{-1} , чем первый член $\delta_{i,j}$, и, следовательно, исчезали в пределе при $L \rightarrow \infty$. Будут ли второй и следующие члены правой части формулы (1.24) более высокого порядка малости по L^{-1} , чем первый член? Чтобы выяснить это, рассмотрим простой пример. Примем, как показано на фиг. 39, что масса третьей частицы бесконечно велика и она покоится. Взяв положение третьей частицы за начало отсчета, представим гамильтониан системы в виде

$$H = K_1 + K_2 + V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}_2) + V_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (1.25)$$

Пусть все потенциалы отличны от нуля в областях размером порядка a^3 . Далее, пусть в состоянии $\Phi_a^{(L)}$ частица 1 свободна, а частица 2 связана около начала

координат 3 потенциалом V_2 . Тогда гамильтониан H нужно разбить по схеме

$$\begin{aligned} H_a &= K_1 + (K_2 + V_2), \\ V_a &= V_1 + V_{12} \end{aligned} \quad (1.26)$$

и волновая функция $\Phi_a^{(L)}$ примет вид

$$\Phi_a^{(L)} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(ik_1 \cdot r_1) \phi^B(r_2), \quad (1.27)$$

где $\phi^B(r_2)$ — волновая функция связанного состояния второй частицы, отличная от нуля в области порядка a^3 и нормированная (по порядку величины) в соответствии с соотношением $|\phi^B|^2 a^3 = 1$. Пусть, далее, в состоянии $\Phi_b^{(L)}$ первая и вторая частицы находятся далеко как от третьей частицы, так и друг от друга. Тогда гамильтониан H разбивается по схеме

$$H_b = K_1 + K_2, \quad V_b = V_1 + V_2 + V_{12} \quad (1.28)$$

и волновая функция $\Phi_b^{(L)}$ дается выражением

$$\Phi_b^{(L)} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(ik_1 \cdot r_1) \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(ik_2 \cdot r_2). \quad (1.29)$$

Согласно формулам (1.27) и (1.29), в этом случае

$$\langle \Phi_b^{(L)} | \Phi_a^{(L)} \rangle \sim \frac{1}{\sqrt{L^3}} \int d^3 r_2 \exp(-ik_2 \cdot r_2) \phi^B(r_2) \sim \sqrt{\frac{a^3}{L^3}}. \quad (1.30)$$

С другой стороны, например, третий член правой части формулы (1.24) можно преобразовать к виду

$$\langle \Phi_b^{(L)} | V_b \frac{1}{E_b - H_a - i\epsilon} \left(1 + V_a \frac{1}{E_b - H - i\epsilon} \right) | \Phi_a^{(L)} \rangle.$$

В первом члене этого выражения оценим слагаемое, отвечающее потенциалу V_2 [напомним, что, согласно формуле (1.28), $V_b = V_1 + V_2 + V_{12}$]. При $E_a = E_b$ получим

$$\begin{aligned} \langle \Phi_b^{(L)} | V_2 \frac{1}{E_b - H_a - i\epsilon} | \Phi_a^{(L)} \rangle &= \\ &= \frac{i}{\epsilon} \langle \Phi_b^{(L)} | V_2 | \Phi_a^{(L)} \rangle = \frac{i}{\epsilon} \frac{1}{\sqrt{L^3}} \times \\ &\times \int d^3 r_2 \exp(-ik_2 \cdot r_2) V_2(r_2) \phi^B(r_2) \sim \frac{V_0}{\epsilon} \sqrt{\frac{a^3}{L^3}}, \end{aligned} \quad (1.31)$$

где V_0 — амплитуда потенциала V_2 . Учитывая соотношение $\varepsilon = \hbar v_0/L$, видим, что член (1.31) более низкого порядка по L^{-1} , чем член (1.30). Таким образом, мы показали, что третий член в выражении (1.24) в целом более низкого порядка малости по L^{-1} , чем первый член. Ситуация еще более обостряется, если учесть вклад остальных слагаемых третьего члена (1.24). Таким образом, формулу (1.20) нельзя доказать, применяя метод гл. 4, § 2, п. «В». Это — первое затруднение теории рассеяния с перегруппировкой частиц.

Второе затруднение связано с вопросом об интегральном уравнении Липпмана — Швингера (1.10). Обозначим совокупность переменных, указывающих положение частиц системы, символом ξ . В случае системы трех тел ξ — это совокупность векторов \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , и \mathbf{r}_3 . Тогда можно выполнить следующее преобразование уравнения (1.10):

$$\begin{aligned} \Psi_a^{(+)}(\xi) &= \Phi_a^{(L)}(\xi) + \frac{1}{E_a - H_a + i\varepsilon} V_a(\xi) \Psi_a^{(+)}(\xi) = \\ &= \Phi_a^{(L)}(\xi) + \frac{1}{E_a - H_a + i\varepsilon} \int \delta(\xi - \xi') V_a(\xi') \Psi_a^{(+)}(\xi') d\xi' = \\ &= \Phi_a^{(L)}(\xi) + \frac{1}{E_a - H_a + i\varepsilon} \int \sum_{a'} \Phi_{a'}^{(L)}(\xi) \Phi_{a'}^{(L)*}(\xi') \times \\ &\quad \times V_a(\xi') \Psi_a^{(+)}(\xi') d\xi' = \Phi_a^{(L)}(\xi) + \\ &\quad + \int d\xi' \sum_{a'} \frac{\Phi_{a'}^{(L)}(\xi) \Phi_{a'}^{(L)*}(\xi')}{E_a - E_{a'} + i\varepsilon} V_a(\xi') \Psi_a^{(+)}(\xi'). \end{aligned} \quad (1.32)$$

В третьем равенстве формулы (1.32) введена полная система собственных функций $\{\Phi_{a'}^{(L)}\}$ гамильтониана H_a . Последняя из формул (1.32) показывает, что амплитуда рассеяния, отвечающая этому интегральному уравнению, содержит только члены типа

$$\langle \Phi_{a'}^{(L)} | V_a | \Psi_a^{(+)} \rangle \quad (1.33)$$

(в качестве конечных состояний разрешены только собственные состояния оператора H_a). Таким образом, если оператор H_a определен, например, формулой

(1.4) (содержит только взаимодействие V_{12}), то в качестве конечных состояний разрешены лишь связанные состояния первой и второй частицы и состояния рассеяния в потенциале V_{12} , а, скажем, связанные состояния первой (или второй) частицы с третьей ни в коем случае не могут появиться. Но если бы интегральное уравнение правильно описывало переходы в любые физически возможные состояния, то, естественно, должны были бы появляться также и конечные состояния, в которых первая (или вторая) частица связана с третьей. Следовательно, уравнение Липпмана — Швингера (1.10) неправильно учитывает асимптотические граничные условия рассеяния.

Интегральное уравнение (1.10) неудовлетворительно также в следующем отношении. Рассмотрим два интегральных уравнения

$$\Psi_a^{(+)} = \Phi_a^{(L)} + \frac{1}{E_i - H_a + i\varepsilon} V_a \Psi_a^{(+)}, \quad (1.34)$$

$$\Psi_b^{(+)} = \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_i - H_b + i\varepsilon} V_b \Psi_b^{(+)}. \quad (1.35)$$

Пользуясь тождеством

$$\frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} = \frac{1}{E_i - H_a + i\varepsilon} \left[1 + V_a \frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} \right],$$

формальное решение

$$\Psi_b^{(+)} = \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} V_b \Phi_b^{(L)}$$

уравнения (1.35) можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \Psi_b^{(+)} &= \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_i - H_a + i\varepsilon} \left[1 + V_a \frac{1}{E_i - H + i\varepsilon} \right] V_b \Phi_b^{(L)} = \\ &= \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_i - H_a + i\varepsilon} V_b \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_i - H_a + i\varepsilon} V_a [\Psi_b^{(+)} - \Phi_b^{(L)}] = \\ &= \frac{i\varepsilon}{E_i - H_a + i\varepsilon} \Phi_b^{(L)} + \frac{1}{E_i - H_a + i\varepsilon} V_a \Psi_b^{(+)}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Можно доказать, что в общем случае, когда $a \neq b$, в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ первый член последнего выражения

в формуле (1.36) обращается в нуль. Следовательно, в указанном пределе уравнение (1.36) превращается в однородное интегральное уравнение

$$\Psi_b^{(+)} = \frac{1}{E_t - H_a + i\epsilon} V_a \Psi_b^{(+)} \quad (1.37)$$

Поэтому линейная комбинация решения $\Psi_a^{(+)}$ уравнения (1.34) и решения $\Psi_b^{(+)}$ уравнения (1.37)

$$\Psi_a^{(+)} + \beta \Psi_b^{(+)} \quad (1.38)$$

тоже будет решением уравнения (1.34). Здесь β — произвольная постоянная, короче говоря, решение уравнения (1.34) определено неоднозначно. Но так как интегральное уравнение эквивалентно граничной задаче для дифференциального уравнения, то по сути дела его решение должно быть определено однозначно. Если же это не так, то интегральное уравнение (1.34) не корректно с математической точки зрения. Причина возникновения такой ситуации будет указана ниже.

Итак, формальная теория рассеяния с перегруппировкой частиц встречается со многими неясностями, т. е. неудовлетворительна. Ее нужно перестроить так, чтобы устранить отмеченные противоречия и неясности. Для простоты ограничимся случаем трех частиц.

§ 2. V -координаты ¹⁾

Начнем с первого затруднения теории рассеяния с перегруппировкой частиц (проблема ортогональности состояний рассеяния). Пусть в начальном (или в конечном) состоянии системы трех частиц частица 1 движется свободно, а частицы 2 и 3 образуют связанное состояние. Обозначим такое состояние системы

¹⁾ По-видимому, символ V введен в название этих координат потому, что ориентированный граф радиус-векторов в данном случае напоминает латинскую букву V . Граф радиус-векторов для этого случая показан на фиг. 41, а. — *Прим. перев.*

трех частиц цифрами

$$1 + (2 + 3).$$

Состояние же, в котором все три частицы свободны, обозначим цифрами

$$1 + 2 + 3.$$

Эти два начальных (или конечных) состояния отличаются одно от другого (их можно различить экспериментально). Будем считать, что они относятся к разным процессам рассеяния, которые назовем каналами. Тогда для системы трех частиц возможны следующие четыре канала:

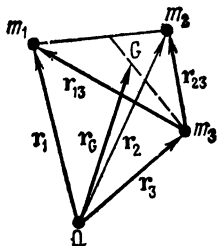
$$\begin{aligned} \text{канал } A: & 1 + (2 + 3), & \text{канал } B: & 2 + (1 + 3), \\ \text{канал } C: & 1 + 2 + 3, & \text{канал } D: & (1 + 2) + 3. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Связанное состояние всех трех частиц $(1 + 2 + 3)$ не может быть взято в качестве начального состояния рассеяния, а в качестве конечного состояния оно запрещено законами сохранения энергии и импульса.

Волновая функция связанного состояния $(2 + 3)$ после исключения движения центра масс зависит от вектора относительного расстояния этих двух частиц \mathbf{r}_{23} и записывается в виде $\varphi^B(\mathbf{r}_{23})$. Когда же частицы 2 и 3 свободны, волновая функция их относительного движения имеет вид плоской волны $L^{-3/2} \exp(ik_{23} \cdot \mathbf{r}_{23})$. Очевидно, что в волновой функции $\varphi^B(\mathbf{r}_{23})$ учтен эффект взаимодействия V_{23} , а в плоской волне взаимодействие не учтено, ввиду чего эти два состояния не ортогональны. Но если вместо плоских волн взять волновые функции $\varphi^{(\pm)}(\mathbf{r}_{23})$ состояний рассеяния в потенциале V_{23} , то они будут ортогональны волновой функции $\varphi^B(\mathbf{r}_{23})$. Ибо это — связанное состояние и состояния непрерывного спектра для одного и того же гамильтониана, ортогональные вследствие того, что отвечающие им собственные значения энергии различны. Следовательно, в § 1 мы неправильно выбрали взаимодействия в разных каналах, что и внесло в теорию элемент неясности. Чтобы правильно распорядиться с взаимодействием, придется ввести специальную систему координат, к рассмотрению которой мы и переходим.

А. V -координаты и асимптотические состояния

Назовем V -координатами такую систему координат, в которой за начало отсчета берется положение третьей частицы. При этом движение частиц 1 и 2 рассматривается с точки зрения частицы 3. Система V -координат показана на фиг. 40. Вместо радиус-векторов трех частиц $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$, определенных относительно



Фиг. 40. V -координаты.

начала отсчета O , в системе V -координат мы пользуемся радиус-векторами $\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_{13}$ и \mathbf{r}_{23} . Величины r_G, r_{13} и r_{23} определены формулами

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_G &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2 + m_3 \mathbf{r}_3}{M} \quad (M = m_1 + m_2 + m_3), \\ \mathbf{r}_{13} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3, \\ \mathbf{r}_{23} &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где \mathbf{r}_G — радиус-вектор центра масс трех частиц, а \mathbf{r}_{13} и \mathbf{r}_{23} — радиус-векторы положения частиц 1 и 2 относительно частицы 3. Вместо положения частицы 3 за начало отсчета можно было бы взять также положение частицы 1 (или 2). Соотношения между импульсами $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3$, канонически сопряженными координатам $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$, и импульсами $\mathbf{p}_G, \mathbf{p}_{13}, \mathbf{p}_{23}$, канонически сопряженными координатам $\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}$, таковы:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_G &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3, \\ \mathbf{p}_{13} &= \frac{m_2 + m_3}{M} \mathbf{p}_1 - \frac{m_1}{M} \mathbf{p}_2 - \frac{m_1}{M} \mathbf{p}_3, \\ \mathbf{p}_{23} &= \frac{m_1 + m_3}{M} \mathbf{p}_2 - \frac{m_2}{M} \mathbf{p}_1 - \frac{m_2}{M} \mathbf{p}_3. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Их легко вывести, пользуясь методом гл. 2, § 1. Подставив выражения (2.3) в полный гамильтониан системы трех частиц

$$\bar{H} = \frac{1}{2m_1} \mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2m_2} \mathbf{p}_2^2 + \frac{1}{2m_3} \mathbf{p}_3^2 + \\ + V_{13}(\mathbf{r}_{13}) + V_{23}(\mathbf{r}_{23}) + V_{12}(\mathbf{r}_{12}), \quad (2.4)$$

получим

$$\bar{H} = \frac{1}{2M} \mathbf{p}_G^2 + \frac{1}{2\mu_{13}} \mathbf{p}_{13}^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_{23}^2 + \frac{1}{m_3} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23} + \\ + V_{13}(\mathbf{r}_{13}) + V_{23}(\mathbf{r}_{23}) + V_{12}(\mathbf{r}_{12}), \quad (2.5)$$

где $\mathbf{r}_{12} \equiv \mathbf{r}_{13} - \mathbf{r}_{23}$ и

$$\mu_{13} = \frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3}, \quad \mu_{23} = \frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3}. \quad (2.6)$$

Первый член выражения (2.5) дает энергию движения центра масс всей системы. Отделяя его, запишем оставшийся гамильтониан в виде

$$H_c = \left[\frac{1}{2\mu_{13}} \mathbf{p}_{13}^2 + V_{13} \right] + \left[\frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_{23}^2 + V_{23} \right] + \\ + \left[V_{12} + \frac{1}{m_3} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23} \right]. \quad (2.7)$$

Первый и второй члены формулы (2.7) дают энергию движения первой и второй частицы относительно третьей частицы, а третий член дает энергию взаимодействия первой и второй частиц. Слагаемое $m_3^{-1} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23}$ третьего члена соответствует непрямому взаимодействию первой и второй частиц через третью частицу. В самом деле, даже если бы между частицами 1 и 2 и не было прямого взаимодействия V_{12} , они все равно могли бы взаимодействовать непрямым образом через частицу 3, например так: частица 1, сталкиваясь с частицей 3, вносит изменение в ее движение, что влияет на движение частицы 2. Взаимодействие $m_3^{-1} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23}$ и учитывает такой эффект. Непрямое взаимодействие исчезает в пределе при $m_3 \rightarrow \infty$, как и должно было бы быть. Но в теории рассеяния его нельзя ставить в ряд с потенциалом взаимодействия, так как непрямое взаимодействие не исчезает, когда три частицы далеки друг от друга.

Для устранения непрямого взаимодействия произведем унитарное преобразование

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{r}}_{13} &\equiv \exp(iX) \mathbf{r}_{13} \exp(-iX) = \mathbf{r}_{13} \operatorname{ch} \alpha + \mathbf{r}_{23} \cdot \operatorname{sh} \alpha, \\ \bar{\mathbf{r}}_{23} &\equiv \exp(iX) \mathbf{r}_{23} \exp(-iX) = \mathbf{r}_{23} \operatorname{ch} \alpha + \mathbf{r}_{13} \operatorname{sh} \alpha, \\ \bar{\mathbf{p}}_{13} &\equiv \exp(iX) \mathbf{p}_{13} \exp(-iX) = \mathbf{p}_{13} \operatorname{ch} \alpha - \mathbf{p}_{23} \operatorname{sh} \alpha, \\ \bar{\mathbf{p}}_{23} &\equiv \exp(iX) \mathbf{p}_{23} \exp(-iX) = \mathbf{p}_{23} \operatorname{ch} \alpha - \mathbf{p}_{13} \operatorname{sh} \alpha, \\ \bar{\mathbf{p}}_G &\equiv \exp(iX) \mathbf{p}_G \exp(-iX) = \mathbf{p}_G,\end{aligned}\quad (2.8)$$

в котором X — оператор вида

$$X = \alpha (\mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{r}_{23} + \mathbf{p}_{23} \cdot \mathbf{r}_{13}), \quad (2.9)$$

а параметр α дается выражением

$$\operatorname{th} 2\alpha = 2 \frac{\mu_{13}\mu_{23}}{m_3 (\mu_{13} + \mu_{23})} < 1, \quad (2.10)$$

После преобразования (2.8) гамильтониан (2.7) принимает вид

$$\begin{aligned}H &\equiv \exp(iX) H_c \exp(-iX) = \\ &= \frac{1}{2\bar{\mu}_{13}} \mathbf{p}_{13}^2 + \frac{\mathbf{p}_{23}^2}{2\bar{\mu}_{23}} + V_{13}(\bar{\mathbf{r}}_{13}) + V_{23}(\bar{\mathbf{r}}_{23}) + V_{12}(\bar{\mathbf{r}}_{12}),\end{aligned}\quad (2.11)$$

где

$$\begin{aligned}\frac{1}{\bar{\mu}_{13}} &= \frac{1}{m_1} \operatorname{ch}^2 \alpha + \frac{1}{m_2} \operatorname{sh}^2 \alpha + \frac{1}{m_3} (\operatorname{ch} \alpha - \operatorname{sh} \alpha)^2, \\ \frac{1}{\bar{\mu}_{23}} &= \frac{1}{m_1} \operatorname{sh}^2 \alpha + \frac{1}{m_2} \operatorname{ch}^2 \alpha + \frac{1}{m_3} (\operatorname{ch} \alpha - \operatorname{sh} \alpha)^2\end{aligned}\quad (2.12)$$

и

$$\bar{\mathbf{r}}_{12} \equiv \bar{\mathbf{r}}_{13} - \bar{\mathbf{r}}_{23} = e^{-\alpha} \mathbf{r}_{12}. \quad (2.13)$$

В гамильтониане (2.11) в отличие от гамильтониана (2.7) все слагаемые взаимодействия обращаются в нуль, когда расстояния между частицами велики. Следовательно, этот гамильтониан пригоден для построения теории рассеяния. Разобьем гамильтониан (2.11) на два слагаемых:

$$H = H_0 + W, \quad (2.14)$$

где

$$\begin{aligned}H_0 &= [K_{13} + V_{13}] + [K_{23} + V_{23}], \\ W &= [\bar{V}_{13} - V_{13}] + [\bar{V}_{23} - V_{23}] + \bar{V}_{12},\end{aligned}\quad (2.15)$$

причем

$$\begin{aligned}
 K_{13} &\equiv \frac{1}{2\bar{\mu}_{13}} \mathbf{p}_{13}^2, & K_{23} &\equiv \frac{1}{2\bar{\mu}_{23}} \mathbf{p}_{23}^2, \\
 V_{13} &\equiv V_{13}(\mathbf{r}_{13}), & V_{23} &\equiv V_{23}(\mathbf{r}_{23}), \\
 \bar{V}_{13} &\equiv V_{13}(\bar{\mathbf{r}}_{13}) = V_{13}(\mathbf{r}_{13} \operatorname{ch} \alpha + \mathbf{r}_{23} \operatorname{sh} \alpha), & (2.16) \\
 \bar{V}_{23} &\equiv V_{23}(\bar{\mathbf{r}}_{23}) = V_{23}(\mathbf{r}_{23} \operatorname{ch} \alpha + \mathbf{r}_{13} \operatorname{sh} \alpha), \\
 \bar{V}_{12} &\equiv V_{12}(\bar{\mathbf{r}}_{12}) = V_{12}(e^{-\alpha} \mathbf{r}_{12}).
 \end{aligned}$$

Если, исходя из гамильтониана (2.14), считать, что состояние в момент $t = \pm\infty$ дается собственной функцией оператора (2.15), а рассеяние обусловлено членом W , то теорию рассеяния можно построить почти в полной параллели с гл. 2. Собственные функции свободного гамильтониана H_0 (2.15) ниже будем называть *асимптотическими состояниями*. С их помощью можно определить каналы рассеяния. Тогда вместо обозначений (2.1) для этих каналов можно принять обозначения

$$\begin{aligned}
 \text{канал } A: & \underbrace{1 + (3 + 2)}_s, & \text{канал } B: & \underbrace{2 + (3 + 1)}_s, & (2.17) \\
 \text{канал } C: & \underbrace{1 + 3}_s + \underbrace{2}_s, & \text{канал } D: & \underbrace{(1 + 2)}_s + \underbrace{3}_s.
 \end{aligned}$$

Их смысл таков. Например, $(3 + 2)$ так же, как и выше, означает связанное состояние с потенциалом взаимодействия V_{23} , а $\underbrace{1 + 3}_s$ — состояние рассеяния частицы 1 относительно частицы 3 в потенциале взаимодействия V_{13} .

Исходя из выражения (2.15), для гамильтониана H_0 и обозначений (2.17) запишем асимптотические состояния $\varphi_{A,n}^{(\pm)}$ в канале A в виде

$$\varphi_{A,n}^{(\pm)} = \varphi_{13}^{(\pm)} (E_n - \mathcal{E}) \varphi_{23}^B(\mathcal{E}), \quad (2.18)$$

где $\varphi_{23}^B(\mathcal{E})$ — волновая функция связанного состояния в потенциале V_{23} , удовлетворяющая уравнению

$$(K_{23} + V_{23}) \varphi_{23}^B(\mathcal{E}) = \mathcal{E} \varphi_{23}^B(\mathcal{E}), \quad \mathcal{E} < 0, \quad (2.19)$$

а $\varphi_{13}^{(\pm)}(E)$ — волновая функция состояния рассеяния, которая дается выражением

$$\varphi_{13}^{(\pm)}(E) = \left[1 + \frac{1}{E - (K_{13} \pm V_{13}) \pm i\varepsilon} V_{13} \right] u_{13}^{(L)}(E), \quad E > 0, \quad (2.20)$$

где $u_{13}^{(L)}(E)$ — плоская волна, удовлетворяющая уравнению

$$K_{13} u_{13}^{(L)}(E) = E u_{13}^{(L)}(E), \quad (2.21)$$

т. е.

$$u_{13}^{(L)}(E) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{13}). \quad (2.22)$$

Построенная таким образом волновая функция (2.18), разумеется, является собственной функцией в канале A

$$H_0 \varphi_{A,n}^{(\pm)} = E_n \varphi_{A,n}^{(\pm)}. \quad (2.23)$$

Аналогично, асимптотические состояния в каналах B и C даются выражениями

$$\begin{aligned} \varphi_{B,n}^{(\pm)} &= \varphi_{13}^B(\mathcal{E}) \varphi_{23}^{(\pm)}(E_n - \mathcal{E}), \\ \varphi_{C,n}^{(\pm)} &= \varphi_{13}^{(\pm)}(E) \varphi_{23}^{(\pm)}(E_n - E). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Волновые функции φ_{13}^B и $\varphi_{13}^{(\pm)}$, с помощью которых выше построены асимптотические состояния, — это волновые функции, первая — связанного состояния, а вторая — состояния рассеяния в задаче одного тела с потенциалом V_{13} . Следовательно, собственные функции связанных состояний φ_{13}^B , принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны друг другу. Кроме того, связанные состояния φ_{13}^B ортогональны состояниям рассеяния $\varphi_{13}^{(\pm)}$, так как им отвечают разные собственные значения энергии. Доказательство ортогональности состояний рассеяния $\varphi_{13}^{(\pm)}$ в пределе $L \rightarrow \infty$ дано в гл. 4 [формула (2.44)]. Аналогичные утверждения справедливы также и для волновых функций φ_{23}^B , $\varphi_{23}^{(\pm)}$, из которых строится еще одно асимптотическое состояние. Следовательно, асимптотические состояния в каналах A , B , C ортонормированы:

$$\langle \varphi_{M,m}^{(\pm)} | \varphi_{N,n}^{(\pm)} \rangle = \delta_{M,n} \delta_{m,n} \quad M, N = A, B, C. \quad (2.25)$$

Асимптотические состояния в канале D имеют другой смысл. В самом деле, в свободный гамильтониан H_0 не входит взаимодействие V_{12} или \bar{V}_{12} , с помощью которого образуется связанное состояние первой и второй частиц. Ограничимся здесь указанием, что асимптотические состояния $\varphi_{D,n}$ в канале D определяются решениями интегрального уравнения

$$(K_{13} + K_{23} + \bar{V}_{12}) \varphi_{D,n} = E_n \varphi_{D,n}. \quad (2.26)$$

Б. Состояния рассеяния и волновой оператор

Асимптотические состояния в каналах A , B и C — собственные состояния оператора H_0 . Поэтому состояния рассеяния $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$, выводимые с помощью взаимодействия W из этих асимптотических состояний $\varphi_{N,n}^{(\pm)}$, так же, как и в гл. 4, определяются формулой

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} = U(W; 0, \mp \infty) \varphi_{N,n}^{(\pm)}. \quad (2.27)$$

Входящий сюда волновой оператор $U(W; 0, \mp \infty)$ можно определить выражениями, аналогичными формулам (2.13) и (2.14) из гл. 4:

$$U(W; 0, \mp \infty) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{\mp \infty}^0 dt \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) U(W; 0, t) W(t), \quad (2.28)$$

$$U(W; \pm \infty, 0) \equiv 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{\pm \infty}^0 dt \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) W(t) U(W; t, 0).$$

Здесь

$$U(W; t, t') = \exp(iH_0 t/\hbar) \exp\{-iH(t-t')/\hbar\} \times \\ \times \exp(-iH_0 t'/\hbar), \quad (2.29)$$

$$W(t) = \exp(iH_0 t/\hbar) W \exp(-iH_0 t/\hbar).$$

При выводе соотношений (2.29) нужно действовать так же, как и в гл. 4: рассмотреть представление взаимодействия, в котором роль свободного гамильтониана играет H_0 , а роль гамильтониана взаимодействия — W . Подставляя формулы (2.28) и (2.29) в (2.27) и интегрируя по времени, получаем

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} = \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\varepsilon} W \right] \varphi_{N,n}^{(\pm)}. \quad (2.30)$$

Очевидно, что волновая функция состояния рассеяния $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$ удовлетворяет уравнению Липпмана — Швингера

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} = \varphi_{N,n}^{(\pm)} + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} W \Psi_{N,n}^{(\pm)}. \quad (2.31)$$

Формулу (2.30) можно также представить в виде

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} = \frac{\pm i\epsilon}{E_n - H \pm i\epsilon} \varphi_{N,n}^{(\pm)}. \quad (2.32)$$

Все эти формулы аналогичны формулам гл. 4.

Докажем теперь, что волновые функции состояний рассеяния в каналах A , B и C удовлетворяют условиям ортонормированности (1.19). Вычисляя скалярное произведение величин (2.32), получаем

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{M,m}^{(+)} | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle &= \frac{i\epsilon}{E_n - E_m + 2i\epsilon} \times \\ &\times [\langle \varphi_{M,m}^{(+)} | \varphi_{N,n}^{(+)} \rangle + \langle \varphi_{M,m}^{(+)} | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Эта формула выводится так же, как формула (1.23). Далее, пользуясь формулой (2.31), получаем

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{M,m}^{(+)} | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle &= \\ &= \langle \varphi_{M,m}^{(+)} | \varphi_{N,n}^{(+)} \rangle + \frac{1}{E_n - E_m + i\epsilon} \langle \varphi_{M,m}^{(+)} | W | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle, \\ \langle \Psi_{M,m}^{(+)} | \varphi_{N,n}^{(+)} \rangle &= \\ &= \langle \varphi_{M,m}^{(+)} | \varphi_{N,n}^{(+)} \rangle + \frac{1}{E_m - E_n - i\epsilon} \langle \Psi_{M,m}^{(+)} | W | \varphi_{N,n}^{(+)} \rangle. \end{aligned}$$

Подставив эти результаты в формулу (2.33), придем к выражению

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{M,m}^{(+)} | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle &= \frac{i\epsilon}{E_n - E_m + 2i\epsilon} \left[2\delta_{M,N} \delta_{m,n} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{E_n - E_m - i\epsilon} \{ \langle \varphi_{M,m}^{(+)} | W | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle - \langle \Psi_{M,m}^{(+)} | W | \varphi_{N,n}^{(+)} \rangle \} \right], \end{aligned} \quad (2.34)$$

полностью совпадающему по форме с выражением (2.39) из гл. 4. При написании первого члена в выражении (2.34) нужно воспользоваться условиями ортонормированности асимптотических состояний (2.25). Наша задача — оценить второй член этого выражения. Согласно определению (2.15), взаимодействие

W дается формулой

$$W = \bar{V}_{12} + \bar{V}_{13} + \bar{V}_{23} - V_{13} - V_{23}. \quad (2.35)$$

Нужно, в частности, иметь в виду, что V_{13} зависит не только от r_{13} , но и от r_{23} , а V_{23} зависит от r_{23} и r_{13} . Рассмотрим случай, когда $M = A$, $N = C$. В этом случае первый матричный элемент второго члена в выражении (2.34) имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{A,m}^{(+)} | W | \Psi_{C,n}^{(+)} \rangle &= \\ &= \langle \varphi_{13}^{(+)} \cdot \varphi_{23}^B | W U(W; 0, -\infty) | \varphi_{13}^{(+)} \cdot \varphi_{23}^{(+)} \rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Оценим порядок малости этого матричного элемента по малому параметру L^{-1} ($L \rightarrow \infty$), рассматривая отдельные слагаемые потенциала взаимодействия W [формула (2.35)]:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{13}^{(+)} | \bar{V}_{13} | \varphi_{13}^{(+)} \rangle &\sim \langle \varphi_{13}^{(+)} | \bar{V}_{23} | \varphi_{13}^{(+)} \rangle \sim \\ &\sim \langle \varphi_{13}^{(+)} | V_{13} | \varphi_{13}^{(+)} \rangle \sim \frac{V_0 a^3}{L^3}, \\ \langle \varphi_{23}^B | \bar{V}_{23} | \varphi_{23}^{(+)} \rangle &\sim \langle \varphi_{23}^B | \bar{V}_{13} | \varphi_{23}^{(+)} \rangle \sim \\ &\sim \langle \varphi_{23}^B | V_{23} | \varphi_{23}^{(+)} \rangle \sim \frac{V_0 a^3}{\sqrt{L^3 a^3}}, \\ \langle \varphi_{13}^{(+)} \varphi_{23}^B | \bar{V}_{12} | \varphi_{13}^{(+)} \varphi_{23}^{(+)} \rangle &\sim \frac{V_0 a^3}{\sqrt{L^3 a^3}}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Здесь V_0 — амплитуда потенциала, a^3 — размер области, в которой потенциал отличен от нуля, $L^{-3/2}$ — нормировочный множитель волновых функций $\varphi_{13}^{(+)}$ и $\varphi_{23}^{(+)}$. Множитель $a^{-3/2}$ появился из условия нормировки волновой функции φ_{23}^B связанного состояния, которое (по порядку величины) имеет вид $|\varphi_{23}^B|^2 a^3 = 1$. Из формул (2.37) видно, что даже с учетом множителя $\varepsilon = \hbar v_0 / L$, даваемого первым множителем второго члена в формуле (2.34), матричный элемент (2.36) имеет порядок малости самое большее $L^{-1/2}$ и в пределе при $L \rightarrow \infty$ обращается в нуль. То же самое можно сказать и о другом матричном элементе второго члена формулы (2.34). Следовательно, второй член в выражении (2.34) при $L \rightarrow \infty$ обращается в нуль и функция $\Psi_{A,m}^{(+)}$ ортогональна функции $\Psi_{C,n}^{(+)}$. То

же самое справедливо и для других скалярных произведений при $M \neq N$ (все они равны нулю, а соответствующие волновые функции ортогональны).

Несколько сложнее рассмотрение скалярного произведения при $M = A$ и $N = A$ (в одном и том же канале). В этом случае матричный элемент

$$\langle \Phi_{A,n}^{(+)} | \mathcal{W} | \Psi_{A,n}^{(+)} \rangle = \langle \Phi_{13}^{(+)} \Phi_{23}^B | \mathcal{W} U(\mathcal{W}; 0, -\infty) | \Phi_{13}^{(+)} \Phi_{23}^B \rangle \quad (2.38)$$

содержит члены вида

$$\langle \Phi_{13}^{(+)} | \Phi_{13}^{(+)} \rangle \langle \Phi_{23}^B | -V_{23} | \Phi_{23}^B \rangle \sim V_0. \quad (2.39)$$

При $E_n = E_m$ в формуле (2.34) появляется слагаемое вида $\varepsilon^{-1} V_0$, расходящееся при $L \rightarrow \infty$. Для всех остальных потенциалов, слагающих взаимодействие \mathcal{W} (кроме потенциала $-V_{23}$), справедливы оценки (2.37) и опасаться нечего: с учетом результата для $U(\mathcal{W}; 0, -\infty)$ члены самого высокого порядка, возникающие от потенциалов, отличных от $-V_{23}$, стремятся к нулю при $L \rightarrow \infty$ [так же, как и в случае (2.36)]. Остается рассмотреть случай, когда в выражении $\mathcal{W} U(\mathcal{W}; 0, -\infty)$ формулы (2.38) величина \mathcal{W} равна $-V_{23}$. Но вклад члена $-V_{23}$ с учетом оценки (2.39) равен нулю. Чтобы показать это, заменим величину \mathcal{W} в формуле (2.38) величиной $-V_{23}$:

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_{13}^{(+)}(E_m - \mathcal{E}) \Phi_{23}^B(\mathcal{E}) | (-V_{23}) \times \\ & \times \left[1 - \frac{1}{E_n - \{(K_{13} + V_{13}) + (K_{23} + V_{23}) - V_{23}\} + i\varepsilon} V_{23} \right] \times \\ & \times | \Phi_{13}^{(+)}(E_n - \mathcal{E}') \Phi_{23}^B(\mathcal{E}') \rangle = \\ & = \langle \Phi_{13}^{(+)}(E_m - \mathcal{E}) | \Phi_{13}^{(+)}(E_n - \mathcal{E}') \rangle \times \\ & \times \langle \Phi_{23}^B(\mathcal{E}) | (-V_{23}) \left[1 - \frac{1}{\mathcal{E}' - K_{23} + i\varepsilon} V_{23} \right] | \Phi_{23}^B(\mathcal{E}') \rangle. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Здесь Φ_{23}^B — волновая функция связанного состояния, удовлетворяющая, согласно формуле (2.19), уравнению

$$\Phi_{23}^B(\mathcal{E}') = \frac{1}{\mathcal{E}' - K_{23}} V_{23} \Phi_{23}^B(\mathcal{E}'), \quad \mathcal{E}' < 0, \quad (2.41)$$

из которого ясно, что в формуле (2.40)

$$\langle \Phi_{23}^B(\mathcal{E}) | (-V_{23}) \left[1 - \frac{1}{\mathcal{E}' - K_{23}} V_{23} \right] | \Phi_{23}^B(\mathcal{E}') \rangle = 0 \quad (2.42)$$

(в данном случае энергетический знаменатель в формуле (2.40) не обращается в нуль, так как $\mathcal{E}' < 0$, а собственные значения K_{23} обычно положительны и можно принять $ie = 0$). Таким образом, матричный элемент (2.38) обращается в нуль при $L \rightarrow \infty$. То же верно для другого матричного элемента второго члена в выражении (2.34). Не равен нулю только первый член. Следовательно, при $M = A$ и $N = A$ волновые функции $\Psi_{A,m}^{(\pm)}$ ортогональны и нормированы. Совершенно то же самое можно сказать о скалярных произведениях в других каналах (отличных от канала $M = A, N = A$). Итак, окончательно для $M, N = A, B, C$ имеем

$$\langle \Psi_{M,m}^{(\pm)} | \Psi_{N,n}^{(\pm)} \rangle = \delta_{M,N} \delta_{m,n}. \quad (2.43)$$

Пользуясь условием ортонормированности (2.43), выясним свойства волнового оператора $U(W; 0, \mp \infty)$. Рассмотрим результат действия волнового оператора на собственную функцию оператора H_0

$$\Phi_0 \equiv \Phi_{13}^B \Phi_{23}^B \quad (2.44)$$

не принадлежащую каналам A, B, C . В состоянии (2.44) обе частицы 1 и 2 связаны с частицей 3. Его волновая функция — решение уравнения

$$H_0 \Phi_{0,n}(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}) = E_n \Phi_{0,n}(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}) \quad (2.45)$$

с отрицательным собственным значением энергии E_n . В этом случае

$$\begin{aligned} U(W; 0, \mp \infty) \Phi_{0,n} &= \\ &= \left(1 + \frac{1}{E_n - H \pm ie} W \right) \Phi_{0,n} = \frac{\pm ie}{E_n - H \pm ie} \Phi_{0,n}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Но собственные значения полного гамильтониана H либо положительны и равны E_S (состояния рассеяния), либо отрицательны и равны E_B (связанные состояния трех частиц). Если в формуле (2.46) в качестве собственного значения оператора H взять E_S , то

$E_n - E_S \neq 0$ и, следовательно, при $\varepsilon \rightarrow 0$ правая часть обращается в нуль. Отрицательные же собственные значения энергии, отвечающие связанному состоянию трех частиц E_B , вообще говоря, не совпадают с отрицательными собственными значениями E_n гамильтониана H_0 , так как собственные значения E_B гамильтониана H получаются с учетом взаимодействия W . Следовательно, $E_n - E_B \neq 0$ и в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ правая часть равенства (2.46) обращается в нуль, т. е.

$$U(W; 0, \mp \infty) \varphi_{0, n} = 0. \quad (2.47)$$

С учетом определения (2.27) имеем

$$\begin{aligned} \sum_{N=A, B, C} \sum_n |\Psi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \varphi_{N, n}^{(\pm)}| &= \\ &= U(W; 0, \mp \infty) \sum_{N=A, B, C} \sum_n |\varphi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \varphi_{N, n}^{(\pm)}|, \end{aligned} \quad (2.48)$$

а согласно формуле (2.47),

$$0 = U(W; 0, \mp \infty) \sum_n |\varphi_{0, n}\rangle \langle \varphi_{0, n}|. \quad (2.49)$$

Складывая почленно равенства (2.49) и (2.48), получаем (с учетом полной системы собственных функций гамильтониана)

$$\begin{aligned} \sum_{N=A, B, C} \sum_n |\Psi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \varphi_{N, n}^{(\pm)}| &= \\ &= U(W; 0, \mp \infty) \left[\sum_{N=A, B, C} \sum_n |\varphi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \varphi_{N, n}^{(\pm)}| + \right. \\ &\quad \left. + \sum_n |\varphi_{0, n}\rangle \langle \varphi_{0, n}| \right] = U(W; 0, \mp \infty). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Эрмитово сопряжение формулы (2.50) дает нам

$$\begin{aligned} U^\dagger(W; 0, \mp \infty) &= U(W; \mp \infty, 0) = \\ &= \sum_{N=A, B, C} \sum_n |\varphi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{N, n}^{(\pm)}|. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Тогда, согласно формулам (2.50) и (2.51),

$$\begin{aligned}
 U^\dagger(W; 0, \mp \infty) U(W; 0, \mp \infty) &= \\
 &= U(W; \mp \infty, 0) U(W; 0, \mp \infty) = \\
 &= \sum_{\substack{M, N=A, B, C \\ m, n}} |\Phi_{M, m}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{M, m}^{(\pm)} | \Psi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \Phi_{N, n}^{(\pm)} | = \\
 &= \sum_n \sum_{N=A, B, C} |\Phi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \Phi_{N, n}^{(\pm)} | = 1 - \sum_n |\Phi_{0, n}\rangle \langle \Phi_{0, n}|. \quad (2.52)
 \end{aligned}$$

Аналогичное выражение в гл. 4 [формула (2.48)] равнялось единице, а в данном случае это не так. При выводе третьего из равенств (2.52) надо воспользоваться условием (2.43). Далее,

$$\begin{aligned}
 U(W; 0, \mp \infty) U^\dagger(W; 0, \mp \infty) &= \\
 &= \sum_{\substack{M, N=A, B, C \\ m, n}} |\Psi_{M, m}^{(\pm)}\rangle \langle \Phi_{M, m}^{(\pm)} | \Phi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{N, n}^{(\pm)} | = \\
 &= \sum_n \sum_{N=A, B, C} |\Psi_{N, n}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{N, n}^{(\pm)} | = \\
 &= 1 - \sum_n |\Psi_{D, n}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{D, n}^{(\pm)} | - \sum_n |\Psi_{0, n}\rangle \langle \Psi_{0, n}|. \quad (2.53)
 \end{aligned}$$

При выводе второго из этих равенств следует воспользоваться ортонормированностью асимптотических состояний, а при выводе последнего — условием полноты системы собственных функций $\{\Psi_{A, n}^{(\pm)}, \Psi_{B, n}^{(\pm)}, \Psi_{C, n}^{(\pm)}, \Psi_{D, n}^{(\pm)}, \Psi_{0, n}\}$ гамильтониана H , где $\Psi_{D, n}^{(\pm)}$ — волновая функция состояния рассеяния в канале D , о которой скоро пойдет речь, а $\Psi_{0, n}$ — волновая функция связанного состояния трех частиц. Во всяком случае ясно, что волновой оператор $U(W; 0, \mp \infty)$ не унитарен.

Формула (2.43) выражает условие ортонормированности асимптотических состояний рассеяния в каналах A, B, C . Но будут ли волновые функции $\Psi_{D, n}^{(\pm)}$ состояний рассеяния в канале D (в которых учтено связанное состояние в потенциале V_{12}) ортогональны волновым функциям состояний рассеяния в других

каналах? Согласно определению (2.11), волновая функция $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ дается формулой

$$\Psi_{D,n}^{(\pm)} = \Phi_{D,n} + \frac{1}{E_n - H \pm i\varepsilon} (\bar{V}_{13} + \bar{V}_{23}) \Phi_{D,n}, \quad (2.54)$$

в которой $\Phi_{D,n}$ — асимптотическое состояние, которое определяется решением уравнения (2.26)

$$(K_{13} + K_{23} + \bar{V}_{12}) \Phi_{D,n}(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}) = E_n \Phi_{D,n}(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}). \quad (2.55)$$

Волновая функция $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ (2.54) удовлетворяет интегральному уравнению

$$\Psi_{D,n}^{(\pm)} = \Phi_{D,n} + \frac{1}{E_n - (K_{13} + K_{23} + \bar{V}_{12}) \pm i\varepsilon} (\bar{V}_{13} + \bar{V}_{23}) \Psi_{D,n}^{(\pm)}, \quad (2.56)$$

Чтобы представить член взаимодействия этого уравнения в виде W (таком же виде, как и в других каналах рассеяния), выполним с учетом формулы (2.28) из гл. 2 следующее преобразование:

$$\begin{aligned} \Psi_{D,n}^{(\pm)} &= \Phi_{D,n} - \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\varepsilon} \left[1 - (V_{13} + V_{23} - \bar{V}_{12}) \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{1}{E_n - (K_{13} + K_{23} + \bar{V}_{12}) \pm i\varepsilon} \right] (\bar{V}_{13} + \bar{V}_{23}) \Psi_{D,n}^{(\pm)} = \\ &= \Phi_{D,n} + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\varepsilon} (\bar{V}_{13} + \bar{V}_{23}) \Psi_{D,n}^{(\pm)} + \\ &\quad + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\varepsilon} (\bar{V}_{12} - V_{13} - V_{23}) [\Psi_{D,n}^{(\pm)} - \Phi_{D,n}] = \\ &= \Phi_{D,n} - \frac{1}{E_n - H_0 - i\varepsilon} (\bar{V}_{12} - V_{13} - V_{23}) \Phi_{D,n} + \\ &\quad + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\varepsilon} [(\bar{V}_{13} - V_{13}) + (\bar{V}_{23} - V_{23}) + \bar{V}_{12}] \Psi_{D,n}^{(\pm)} = \\ &= \chi_{D,n}^{(\pm)} + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\varepsilon} W \Psi_{D,n}^{(\pm)}. \quad (2.57) \end{aligned}$$

Здесь

$$\chi_{D,n}^{(\pm)} = \Phi_{D,n} + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\varepsilon} (V_{13} + V_{23} - \bar{V}_{12}) \Phi_{D,n}. \quad (2.58)$$

Величину $\chi_{D,n}^{(\pm)}$ можно разложить на множители:

$$\begin{aligned} \chi_{D,n}^{(\pm)} &= \Phi_{D,n} + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \Phi_{D,n} - \\ &- \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \right] \frac{1}{E_n - (K_{13} + K_{23}) \pm i\epsilon} \bar{V}_{12} \Phi_{D,n} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \right] \times \\ &\quad \times \left[1 - \frac{1}{E_n - (K_{13} + K_{23}) \pm i\epsilon} \bar{V}_{12} \right] \Phi_{D,n}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Чтобы выяснить свойства функции $\chi_{D,n}^{(\pm)}$, рассмотрим гамильтониан

$$H_D = \frac{1}{2\mu_{13}} \mathbf{p}_{13}^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_{23}^2 + \frac{1}{m_3} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23} + V_{12}(\mathbf{r}_{12}). \quad (2.60)$$

Произведем преобразование

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{m_1 \mathbf{r}_{13} + m_2 \mathbf{r}_{23}}{m_1 + m_2}, & \mathbf{r}_{12} &= \mathbf{r}_{13} - \mathbf{r}_{23}, \\ \mathbf{P}_R &= \mathbf{p}_{13} + \mathbf{p}_{23}, & \mathbf{p}_{12} &= \frac{m_2 \mathbf{p}_{13} - m_1 \mathbf{p}_{23}}{m_1 + m_2}, \end{aligned} \quad (2.61)$$

эквивалентное переходу в систему центра масс первой и второй частиц. Тогда он примет вид

$$H_D = \frac{M}{2(m_1 + m_2)m_3} \mathbf{P}_R^2 + \frac{m_1 + m_2}{2m_1 m_2} \mathbf{p}_{12}^2 + V_{12}(\mathbf{r}_{12}). \quad (2.62)$$

Его собственные волновые функции можно записать в виде

$$\phi_{D,n}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}) = u_c^{(L)}(\mathbf{R}, E_n - \mathcal{E}) \phi_{12}^B(\mathcal{E}), \quad (2.63)$$

где $u_c^{(L)}$ — плоская волна, удовлетворяющая уравнению

$$\left[\frac{M}{2(m_1 + m_2)m_3} \mathbf{P}_R^2 - E \right] u_c^{(L)}(\mathbf{R}, E) = 0, \quad (2.64)$$

а ϕ_{12}^B — волновая функция связанного состояния первой и второй частиц, являющаяся решением уравнения

$$\left[\frac{m_1 + m_2}{2m_1 m_2} \mathbf{p}_{12}^2 + V_{12} - \mathcal{E} \right] \phi_{12}^B(\mathbf{r}_{12}, \mathcal{E}) = 0, \quad \mathcal{E} < 0. \quad (2.65)$$

Сравнивая определения (2.7), (2.11) и (2.60), выведем соотношение

$$(K_{13} + K_{23} + \bar{V}_{12}) = \exp(iX) H_D \exp(-iX), \quad (2.66)$$

из которого вытекает, что асимптотическое состояние $\Phi_{D,n}$ [формула (2.55)] и функция $\phi_{D,n}$ [формула (2.63)] связаны формулой

$$\Phi_{D,n}(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}) = \exp(iX) \phi_{D,n}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}). \quad (2.67)$$

Поэтому величину (2.59) можно вычислить следующим образом:

$$\begin{aligned} \chi_{D,n}^{(\pm)} &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \right] \exp(iX) \exp(-iX) \times \\ &\times \left[1 - \frac{1}{E_n - (K_{13} + K_{23}) + i\epsilon} \bar{V}_{12} \right] \exp(iX) \exp(-iX) \Phi_{D,n} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \right] \exp(iX) \times \\ &\times \left[1 - \left\{ E_n - \left(\frac{M}{2(m_1 + m_2)m_3} \mathbf{P}_R^2 + \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \frac{m_1 + m_2}{2m_1 m_2} \mathbf{p}_{12}^2 \right) \pm i\epsilon \right\}^{-1} V_{12}(\mathbf{r}_{12}) \right] \phi_{D,n} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \right] \exp(iX) u_c^{(L)}(\mathbf{R}, E_n - \mathcal{E}) \times \\ &\times \left[1 - \frac{1}{\mathcal{E} - \frac{(m_1 + m_2)}{2m_1 m_2} \mathbf{p}_{12}^2} V_{12}(\mathbf{r}_{12}) \right] \phi_{12}^B(\mathcal{E}) = 0. \quad (2.68) \end{aligned}$$

При выводе последнего из равенств (2.68) нужно воспользоваться тем, что ϕ_{12}^B — волновая функция связанного состояния, удовлетворяющая уравнению (2.65). Довольно громоздкие выкладки (2.68) показывают, что неоднородный член интегрального уравнения (2.57) равен нулю, т. е.

$$\Psi_{D,n}^{(\pm)} = \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} W \Psi_{D,n}^{(\pm)}. \quad (2.69)$$

Таким образом, волновая функция $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ состояния рассеяния (2.54) удовлетворяет однородному уравнению (2.69), если в качестве взаимодействия взять W ,

(так же, как в каналах рассеяния A, B, C). Равенство нулю неоднородного члена в уравнении (2.69) означает, что волновую функцию $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ состояния рассеяния нельзя построить с помощью волнового оператора, как мы делали в формуле (2.27). Это естественно: хотя волновой оператор и «строит» состояния рассеяния для взаимодействия V_{12} , он, разумеется, не может построить связанных состояний для этого взаимодействия¹⁾.

Пользуясь интегральным уравнением (2.69), можно доказать ортогональность волновых функций $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ и $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$ ($N = A, B, C$):

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{N,n}^{(\pm)} | \Psi_{D,n}^{(\pm)} \rangle &= \langle \Phi_{N,n}^{(\pm)} | 1 - \frac{1}{E_m - H_0 \pm i\epsilon} W | \Psi_{D,n}^{(\pm)} \rangle = \\ &= \langle \Phi_{N,n}^{(\pm)} | \Psi_{D,n}^{(\pm)} \rangle - \langle \Phi_{N,n}^{(\pm)} | \Psi_{D,n}^{(\pm)} \rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Пользуясь формулами (2.55) и (2.56), можно так же, как мы доказывали справедливость равенства (2.43), доказать, что функции $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ нормированы:

$$\langle \Psi_{D,m}^{(\pm)} | \Psi_{D,n}^{(\pm)} \rangle = \delta_{m,n}. \quad (2.71)$$

Ортонормированность асимптотических состояний лучше всего доказывать, пользуясь соотношением (2.67):

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{D,m} | \Phi_{D,n} \rangle &= \langle \phi_{D,m} | \exp(-iX) \exp(iX) | \phi_{D,n} \rangle = \\ &= \langle \phi_{D,m} | \phi_{D,n} \rangle = \delta_{m,n}. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Заметим, что член, подобный члену (2.39), здесь не появляется, поскольку потенциалы взаимодействия V_{13} и V_{23} в формуле (2.54) не зависят от переменных r_{13} и r_{23} . Итак, нами доказано, что условия ортонормированности (2.43) выполняются во всех каналах рассеяния A, B, C и D .

Интегральные уравнения (2.31) и (2.69) неудовлетворительны в том отношении, что к решению $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$

¹⁾ Эти связанные состояния учтены в волновой функции $\Psi_{D,n}^{(+)}$ состояния рассеяния в канале D . — Прим. перев.

уравнения (2.31) можно добавить решение $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ уравнения (2.69), умноженное на произвольную константу β , и такая линейная комбинация

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} + \beta \Psi_{D,n}^{(\pm)} \quad (2.73)$$

тоже будет решением уравнения (2.31). Следовательно, решение интегрального уравнения (2.31), в котором учтены граничные условия, неоднозначно. О таком недостатке интегрального уравнения Липпмана—Швингера мы уже говорили в § 1. Но в излагаемой здесь теории волновая функция $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$ определяется не решением интегрального уравнения (2.31), а действием волнового оператора на асимптотическое состояние $\Phi_{N,n}^{(\pm)}$ по формулам (2.27) или (2.30). При этом случайно оказывается, что она удовлетворяет интегральному уравнению (2.31). Таким образом, полученное здесь состояние рассеяния определено однозначно и отмеченной выше неоднозначности в действительности нет. То же можно сказать о волновой функции $\Psi_{D,n}^{(\pm)}$ состояния рассеяния в канале D : оно определено формулой (2.54), и случайно оказывается, что определенная так величина удовлетворяет однородному интегральному уравнению. Но если определять величину $\Psi_a^{(\pm)}$, согласно теории § 1 [как решение интегрального уравнения (1.10)], то определение оказывается неоднозначным. В этом смысле правильнее пользоваться не интегральным уравнением (2.31), а предельной операцией (2.28), посредством которой выводится формула (2.30).

То обстоятельство, что определение на основе формулы (2.30) более приемлемо, чем на основе интегрального уравнения (2.31), подтверждается следующими соображениями. Подставим в уравнение (2.31) условие полноты собственных функций свободного гамильтониана H_0 , т. е. условие полноты асимптотических состояний

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} \approx \Phi_{N,n}^{(\pm)} + \int d\xi' \sum_{m=A,B,C} \frac{\Phi_{M,m}^{(\pm)}(\xi) \Phi_{M,m}^{(\pm)}(\xi')}{E_n - E_m \pm \varepsilon} W(\xi') \Psi_{N,n}^{(\pm)}(\xi'). \quad (2.74)$$

Но собственные функции оператора H_0 не учитывают вклад состояния $\varphi_{0,n} = \varphi_{13}^B \varphi_{23}^B$, в котором обе частицы 1 и 2 связаны с частицей 3. В самом деле, ввиду отрицательности собственного значения энергии в этом состоянии энергетический знаменатель в формуле (2.74) никогда не обращается в нуль (что и означает отсутствие рассеяния при большом удалении частиц 1 и 2 от частицы 3). Таким образом, уравнение (2.74) разрешает в качестве конечных состояний только состояния в каналах A, B, C и не оставляет места для появления состояний в канале D . Иными словами, интегральное уравнение Липпмана — Швингера неправильно отражает асимптотические граничные условия. А в определении (2.30) нужно подставлять условие полноты собственных функций полного гамильтониана H

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} \approx \varphi_{N,n}^{(\pm)} + \int d\xi' \sum_{m=A,B,C,D} \frac{\Psi_{M,m}^{(\pm)}(\xi) \Psi_{M,m}^{(\pm)*}(\xi')}{E_n - E_m \pm i\epsilon} \mathcal{W}(\xi') \varphi_{N,n}(\xi'). \quad (2.75)$$

В формуле (2.75) не учтен только вклад связанного состояния трех частиц $\Psi_{0,n}$. Эта формула описывает также и переходы в канал D , т. е. в ней учтены все возможные конечные состояния. Но уравнение (2.75) нелинейно относительно $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$, и решить его практически невозможно. Разложение (2.30) функции Грина $(E_n - H \mp i\epsilon)^{-1}$ в ряд по степеням взаимодействия \mathcal{W} по существу означает работу с уравнением (2.75). Один из подходов к проблеме, позволяющий обойтись без уравнения (2.75), основан на методе Фаддеева, который рассматривается ниже, в § 4.

B. S-матрица и S-оператор

Можно определить S-матрицу формулой, эквивалентной формуле (1.16):

$$S_{M,f; N,i} = \langle \Psi_{M,f}^{(-)} | \Psi_{N,i}^{(+)} \rangle. \quad (2.76)$$

Здесь M, N означают все каналы рассеяния A, B, C и D . Если среди каналов M и N не содержится канал

D , то, согласно определению (2.27), можно написать

$$S_{M, f; N, i} = \langle \varphi_{M, f}^{(-)} | U^{\dagger}(W; 0, +\infty) U(W; 0, -\infty) | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle = \langle \varphi_{M, f}^{(-)} | S(W) | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle, \quad (2.77)$$

где $S(W)$ — оператор, следующим образом определяющийся для каналов A , B и C :

$$S(W) \equiv U^{\dagger}(W; 0, +\infty) U(W; 0, -\infty) = U(W; +\infty, 0) U(W; 0, -\infty). \quad (2.78)$$

Пользуясь формулой (2.28), преобразуем оператор $S(W)$:

$$\begin{aligned} S(W) &= U(W; +\infty, 0) U(W; 0, -\infty) = \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) W(t) U(W; t, 0) \right] \times \\ &\quad \times U(W; 0, -\infty) = U(W; 0, -\infty) + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) W(t) U(W; t, 0) U(W; 0, -\infty) - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) W(t) U(W; t, -\infty) = \\ &= U(W; -\infty, 0) U(W; 0, -\infty) - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) W(t) U(W; t, -\infty) = \\ &= 1 - \sum_n | \varphi_{0, n} \rangle \langle \varphi_{0, n} | - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-\varepsilon |t|/\hbar) W(t) U(W; t, -\infty). \end{aligned} \quad (2.79)$$

При выводе четвертого из равенств (2.79) нужно воспользоваться формулой (2.28), определяющей $U(W; t, -\infty)$, а при выводе последнего равенства при-

менить формулу (2.52). Последнее выражение в формуле (2.79) отличается от формулы (2.54) из гл. 4 наличием второго слагаемого. Применяя вывод, аналогичный выводу (2.61) из гл. 4, для матричных элементов (2.79) в каналах A, B, C можно получить выражение

$$S_{M, f; N, i} = \langle \varphi_{M, f}^{(-)} | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle - \sum_n \langle \varphi_{M, f}^{(-)} | \varphi_{0, n} \rangle \langle \varphi_{0, n} | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle - \\ - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \varphi_{M, f}^{(-)} | W | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle.$$

Второе слагаемое равно нулю в силу ортогональности асимптотических состояний $\varphi_{M, m}^{(\pm)}$ и $\varphi_{0, n}$. Первое слагаемое равно нулю при $M \neq N$. Поэтому можно написать

$$S_{M, f; N, i} = \delta_{M, N} \langle \varphi_{N, f}^{(-)} | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle - \\ - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \varphi_{M, f}^{(-)} | W | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle. \quad (2.80)$$

Если же начальное состояние принадлежит одному из каналов A, B, C , а конечное — каналу D , то S -матрицу (2.76) нельзя выразить через S -оператор (2.79). В этом случае для элемента матрицы рассеяния имеем

$$S_{D, f; N, i} = \langle \Psi_{D, f}^{(-)} | \Psi_{N, i}^{(+)} \rangle = \\ = \langle \Psi_{D, f}^{(-)} | \left(1 + \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} W \right) | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle = \\ = \langle \Psi_{D, f}^{(-)} | W \frac{1}{E_f - H_0 + i\epsilon} | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle + \\ + \langle \Psi_{D, f}^{(-)} | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} W | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle = \\ = \left(\frac{1}{E_f - E_i + i\epsilon} + \frac{1}{E_i - E_f - i\epsilon} \right) \langle \Psi_{D, f}^{(-)} | W | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle = \\ = -2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \Psi_{D, f}^{(-)} | W | \varphi_{N, i}^{(+)} \rangle. \quad (2.81)$$

Для вывода третьего из этих равенств нужно воспользоваться уравнением (2.69). Если начальное состояние принадлежит каналу D , то можно воспользоваться V -координатами с началом отсчета в частице 1 или 2. Тогда роль канала D будут играть каналы A

или B . Следовательно, случай, когда начальное состояние принадлежит каналу D , не нуждается в особом рассмотрении.

Докажем, наконец, оптическую теорему, пользуясь тем обстоятельством, что совокупность собственных состояний полного гамильтониана H

$$\{\Psi_{0,n}, \Psi_{A,n}^{(\pm)}, \Psi_{B,n}^{(\pm)}, \Psi_{C,n}^{(\pm)}, \Psi_{D,n}^{(\pm)}\} \quad (2.82)$$

образует полную ортонормированную систему функций. Здесь $\Psi_{0,n}$ — волновая функция связанного состояния трех частиц, собственное значение энергии E_n в котором отрицательно. Условие полноты системы (2.82) имеет вид

$$\sum_{\substack{L=0, A, \\ B, C, D}} \sum_l |\Psi_{L,l}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{L,l}^{(\pm)}| = 1. \quad (2.83)$$

Подставляя его в условие ортонормированности состояний рассеяния (2.43), получим с учетом ортогональности волновых функций $\Psi_{N,n}^{(+)}$ и $\Psi_{0,n}$ (последняя волновая функция принадлежит состоянию с отрицательным собственным значением энергии)

$$\sum_l \sum_{\substack{L=A, B, \\ C, D}} \langle \Psi_{M,m}^{(+)} | \Psi_{L,l}^{(-)} \rangle \langle \Psi_{L,l}^{(-)} | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle = \delta_{M,N} \delta_{m,n}, \quad (2.84)$$

$(M, N = A, B, C, D).$

Если M, N принимают значения A, B, C , то, пользуясь формулами (2.77) и (2.81), формулу (2.84) можно переписать в виде

$$\sum_{L=A, B, C} \sum_l \langle \Phi_{M,m}^{(+)} | S^\dagger(W) | \Phi_{L,l}^{(-)} \rangle \langle \Phi_{L,l}^{(-)} | S(W) | \Phi_{N,n}^{(+)} \rangle + \\ + \sum_l \langle \Psi_{M,m}^{(+)} | \Psi_{D,l}^{(-)} \rangle \langle \Psi_{D,l}^{(-)} | \Psi_{N,n}^{(+)} \rangle = \delta_{M,N} \delta_{m,n}, \quad (2.85)$$

откуда ясно, что S -оператор не унитарен. Но, согласно формуле (2.84), S -матрица унитарна. Неунитарность S -оператора связана с тем, что переходы в состоянии $\Psi_{D,l}^{(\pm)}$ (содержащие связанные состояния в потенциале V_{12}) играют для S -оператора роль реак-

ций. Далее, полагая в формуле (2.85) $M = N = A$, $m = n = i$, $l = f$, получаем

$$\sum_{L=A, B, C} \sum_f |\langle \varphi_{L, f}^{(-)} | S(W) | \varphi_{A, i}^{(+)} \rangle|^2 + \sum_f |\langle \Psi_{D, f}^{(-)} | U(W; 0, -\infty) | \varphi_{A, i}^{(+)} \rangle|^2 = 1. \quad (2.86)$$

Подставляя сюда выражение (2.80) и (2.81) и вводя определения

$$T_{A, f; A, i} = \langle \varphi_{23}^B | \varphi_{23}^B \rangle \langle u_{13}^{(L)} | V_{13} | \varphi_{13}^{(+)} \rangle + \langle \varphi_{A, f}^{(-)} | W | \Psi_{A, i}^{(+)} \rangle, \quad (2.87)$$

$$T_{N, f; A, i} = \langle \varphi_{N, f}^{(-)} | W | \Psi_{A, i}^{(+)} \rangle \quad (N = B, C), \quad (2.88)$$

$$T_{D, f; A, i} = \langle \Psi_{D, f}^{(-)} | W | \varphi_{A, i}^{(+)} \rangle, \quad (2.89)$$

$$\omega_{L, f; A, i} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |T_{L, f; A, i}|^2, \quad (2.90)$$

получаем

$$\sum_f \left\{ \omega_{A, f; A, i} + \sum_{L=B, C, D} \omega_{L, f; A, i} \right\} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} T_{A, i; A, i}. \quad (2.91)$$

Это — обобщенная форма оптической теоремы (2.93) из гл. 4. Волновая функция $u_{13}^{(L)}$, входящая в формулу (2.87), — плоская волна:

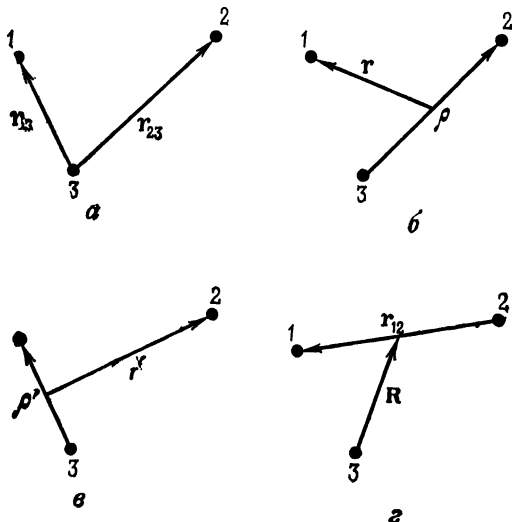
$$u_{13}^{(L)}(\mathbf{r}_{13}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{k}_{13} \cdot \mathbf{r}_{13}). \quad (2.92)$$

§ 3. Переход к T -координатам ¹⁾

При построении теории рассеяния в системе трех тел в предыдущем параграфе мы пользовались V -координатами (фиг. 41, *a*) и для устранения появляющегося в этом случае взаимодействия $(1/m_3)\mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23}$, не

¹⁾ Символ T введен в название этих координат, по-видимому, на том основании, что граф радиус-векторов (фиг. 41, *b-г*) в данном случае напоминает латинскую букву T . — *Прим. перев.*

исчезающего на бесконечности, применяли каноническое преобразование (2.8). С помощью V -координат мы показали полноту и ортонормированность асимптотических состояний и состояний рассеяния (чего мы не могли сделать в § 1) и провели общий анализ



Фиг. 41. Различные системы координат.

a — V -координаты; $б$ — T_A -координаты; $в$ — T_B -координаты; $г$ — T_D -координаты.

свойств рассеяния. Таким образом, система V -координат очень удобна для изложения общей теории рассеяния. Но она не очень неудобна при решении конкретных задач. Рассмотрим, например, канал A . В этом случае (фиг. 41, a) частицы 2 и 3, взаимодействующие с потенциалом V_{23} , образуют связанное состояние, с которым сталкивается частица 1. С учетом формул (2.14), (2.15) и (2.16) можно принять, что взаимодействие низшего порядка между частицами 1 и 3 есть $V_{13}(r_{13})$, но между частицами 1 и 2 взаимодействие низшего порядка обязано быть²⁾

²⁾ Так как в случае частиц 1 и 2 в формуле (2.15) нет других слагаемых взаимодействия, кроме V_{12} . — Прим. перев.

$\bar{V}_{12} = V_{12}(e^{-\alpha r_{12}})$. Пусть для простоты первое из этих взаимодействий будет кулоновским притяжением, а второе — кулоновским отталкиванием. Известно, что при сложении потенциалов $-e^2/r_{13}$ и e^2/r_{12} возникает потенциал диполя, обратно пропорциональный квадрату расстояния между частицей 1 и центром масс связанной системы $(2+3)^3$). Но в нашем случае аргумент \bar{r}_{12} потенциала \bar{V}_{12} содержит множитель $\exp(-\alpha)$. Поэтому при сложении V_{13} и \bar{V}_{12} члены первого порядка малости по r^{-1} не уничтожатся взаимно и сумма потенциалов будет обратно пропорциональна не второй, а первой степени расстояния. Если сверх того учесть взаимодействия \bar{V}_{13} и \bar{V}_{23} , то ситуация усложнится еще больше. Таким образом, форма потенциала взаимодействия в V -координатах, получаемая после унитарного преобразования (2.8), неестественна. В этом случае очень трудно придумать систему приближений, рациональную с физической точки зрения. Поэтому рассмотрим преобразование физических величин от V -координат к координатам более естественным с точки зрения физической интуиции.

А. Начальное и конечное состояние в системе T -координат

Начнем с канала A . Так как в нем частицы 2 и 3 связаны, то естественно воспользоваться системой координат T_A , показанной на фиг. 41, б, в которой система частиц характеризуется вектором ρ относительного положения частиц 2 и 3 и вектором r , соединяющим центр масс этих двух частиц с частицей 1. Переменные ρ , r связаны с соотношениями переменными r_{13} , r_{23} V -координат

$$r = r_{13} - \frac{m_2}{m_2 + m_3} r_{23}, \quad \rho = r_{23}. \quad (3.1)$$

Пользуясь методом гл. 2, § 1, легко убедиться, что соотношения между канонически сопряженными к ним переменными имеют вид

$$p_r = p_{13}, \quad p_\rho = p_{23} + \frac{m_2}{m_2 + m_3} p_{13}. \quad (3.2)$$

³⁾ Это верно при больших r . — *Прим. перев.*

Преобразуя выражение (2.7) с учетом соотношений (3.1) и (3.2), получаем

$$H_c = \frac{1}{2\mu_{1; 2, 3}} \mathbf{p}_r^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_\rho^2 + V_{23}(\rho) + V_{13}(\mathbf{r}, \rho) + V_{12}(\mathbf{r}, \rho), \quad (3.3)$$

где $\mu_{1; 2, 3} = m_1(m_2 + m_3)/M$. Начальное (или конечное) состояние системы $\phi_{A, n}(\mathbf{r}, \rho)$ описывается собственной функцией гамильтониана

$$\begin{aligned} H_A^{(T)} &= \frac{1}{2\mu_{13}} \mathbf{p}_{13}^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_{23}^2 + \frac{1}{m_3} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23} + V_{23}(r_{23}) = \\ &= \frac{1}{2\mu_{1; 2, 3}} \mathbf{p}_r^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_\rho^2 + V_{23}(\rho) \equiv K(\mathbf{r}, \rho) + V_{23}(\rho), \end{aligned} \quad (3.4)$$

удовлетворяющей уравнению

$$H_A^{(T)} \phi_{A, n}(\mathbf{r}, \rho) = E_n \phi_{A, n}(\mathbf{r}, \rho). \quad (3.5)$$

Так как в начальном (или конечном) состоянии канала C нет связанных комплексов, в этом канале, так же как и в канале A , можно использовать систему координат T_A . Тогда начальное (или конечное) состояние $\phi_{C, n}(\mathbf{r}, \rho)$ будет решением уравнения

$$H_C^{(T)} \phi_{C, n}(\mathbf{r}, \rho) = E_n \phi_{C, n}(\mathbf{r}, \rho), \quad (3.6)$$

где

$$H_C^{(T)} = \frac{1}{2\mu_{1; 2, 3}} \mathbf{p}_r^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_\rho^2 \equiv K(\mathbf{r}, \rho). \quad (3.7)$$

В канале B связанное состояние образуют частицы 1 и 3. В этом случае более целесообразно использовать систему координат T_B , показанную на фиг. 41, в. Преобразование от V -координат к T_B -координатам имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r}_{23} - \frac{m_1}{m_1 + m_3} \mathbf{r}_{13}, & \rho' &= r_{13}, \\ \mathbf{p}'_r &= \mathbf{p}_{23}, & \mathbf{p}'_{\rho'} &= \mathbf{p}_{13} + \frac{m_1}{m_1 + m_3} \mathbf{p}_{23}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Преобразуя к этим координатам выражение (2.7), получаем

$$H_c = \frac{1}{2\mu_{2; 1, 3}} p_{r'}^2 + \frac{1}{2\mu_{13}} p_{\rho'}^2 + V_{13}(\rho') + \\ + V_{23}(r', \rho') + V_{12}(r', \rho'), \quad (3.9)$$

где $\mu_{2; 1, 3} = m_2(m_1 + m_3)/M$.

В этом случае начальное (или конечное) состояние $\phi_{B, n}(r', \rho')$ описывается собственной функцией гамильтониана

$$H_B^{(T)} = \frac{1}{2\mu_{13}} p_{13}^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} p_{23}^2 + \frac{1}{m_3} p_{13} \cdot p_{23} + V_{13}(r_{13}) = \\ = \frac{1}{2\mu_{2; 1, 3}} p_{r'}^2 + \frac{1}{2\mu_{13}} p_{\rho'}^2 + V_{13}(\rho') \equiv K(r', \rho') + V_{13}(\rho'), \quad (3.10)$$

удовлетворяющей уравнению

$$H_B^{(T)} \phi_{B, n}(r', \rho') = E_n \phi_{B, n}(r', \rho'). \quad (3.11)$$

Наконец, в канале D удобно воспользоваться системой координат T_D , показанной на фиг. 41, *з*, так как в этом канале связаны частицы 1 и 2. В этом случае

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{13} - \mathbf{r}_{23}, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_{13} + m_2 \mathbf{r}_{23}}{m_1 + m_2}, \quad (3.12) \\ p_{12} = \frac{m_2 p_{13} - m_1 p_{23}}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{P}_R = \mathbf{p}_{13} + \mathbf{p}_{23},$$

а волновая функция $\phi_{D, n}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12})$ удовлетворяет уравнению

$$H_D^{(T)} \phi_{D, n}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}) = E_n \phi_{D, n}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}), \quad (3.13)$$

в котором

$$H_D^{(T)} = \frac{1}{2\mu_{13}} p_{13}^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} p_{23}^2 + \frac{1}{m_3} p_{13} \cdot p_{23} + V_{12}(r_{12}) = \\ = \frac{1}{2\mu_{3; 1, 2}} p_R^2 + \frac{1}{2\mu_{12}} p_{12}^2 + V_{12}(r_{12}) \quad (3.14)$$

$$\mu_{3; 1, 2} = m_3(m_1 + m_2)/M.$$

Б. Состояния рассеяния и S -матрица в T -координатах

Волновые функции $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$ состояний рассеяния в каналах A, B, C в V -координатах даются формулой (2.30):

$$\Psi_{N,n}^{(\pm)} = \left(1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\epsilon} W \right) \Phi_{N,n}^{(\pm)}. \quad (3.15)$$

Запишем это выражение в T -координатах соответствующих каналов.

Волновые функции начальных (или конечных) состояний $\Phi_{N,n}$ в V -координатах являются решениями уравнений

$$\begin{aligned} [K_{13} + (K_{23} + V_{23})] \Phi_{A,n} &= E_n \Phi_{A,n}, \\ [(K_{13} + V_{13}) + K_{23}] \Phi_{B,n} &= E_n \Phi_{B,n}, \\ [K_{13} + K_{23}] \Phi_{C,n} &= E_n \Phi_{C,n}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Части этих волновых функций, ответственные за учет взаимодействий V_{13} или V_{23} , описывают связанные состояния, отвечающие этим потенциалам. Асимптотические состояния $\Phi_{N,n}^{(\pm)}$, входящие в формулу (3.15), связаны с $\Phi_{N,n}$ соотношениями

$$\begin{aligned} \Phi_{A,n}^{(\pm)} &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} V_{13} \right] \Phi_{A,n}, \\ \Phi_{B,n}^{(\pm)} &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} V_{23} \right] \Phi_{B,n}, \\ \Phi_{C,n} &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \right] \Phi_{C,n}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

На основании этих соотношений из формулы (3.15) получаем

$$\begin{aligned} \Psi_{A,n}^{(\pm)} &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\epsilon} W \right] \left[1 + \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} V_{13} \right] \Phi_{A,n} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\epsilon} W + \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{W}{E_n - H \pm i\epsilon} \right) \frac{1}{E_n - H_0 \pm i\epsilon} V_{13} \right] \Phi_{A,n} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\epsilon} (W + V_{13}) \right] \Phi_{A,n} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\epsilon} \{ \bar{V}_{13} + (\bar{V}_{23} - V_{23}) + \bar{V}_{12} \} \right] \Phi_{A,n}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

При выводе третьего из равенств (3.18) нужно воспользоваться формулами (2.28) из гл. 2. Путем аналогичных преобразований можно получить

$$\Psi_{B,n}^{(\pm)} = \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\varepsilon} \{(\bar{V}_{13} - V_{13}) + \bar{V}_{23} + \bar{V}_{12}\} \right] \Phi_{B,n}, \quad (3.19)$$

$$\Psi_{C,n}^{(\pm)} = \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\varepsilon} (\bar{V}_{13} + \bar{V}_{23} + \bar{V}_{12}) \right] \Phi_{C,n}. \quad (3.20)$$

Формулы (3.18) — (3.20) выражают волновые функции состояний рассеяния в V -координатах. Их можно преобразовать к T -координатам. Для этого сначала рассмотрим связь между $\Phi_{N,n}$, определенными в V -координатах, и $\phi_{N,n}$, определенными в соответствующих T -координатах. Чтобы записать первую и вторую формулы (3.16) в координатах T_A , выполним преобразование, обратное унитарному преобразованию (2.8):

$$\begin{aligned} \exp(-iX) [K_{13} + (K_{23} + V_{23})] \exp(iX) \exp(-iX) \Phi_{A,n} &= \\ &= E_n \exp(-iX) \Phi_{A,n}, \quad (3.21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \exp(-iX) [K_{13} + K_{23}] \exp(iX) \exp(-iX) \Phi_{C,n} &= \\ &= E_n \exp(-iX) \Phi_{C,n}. \end{aligned}$$

В силу формулы (2.11) имеем

$$\begin{aligned} \exp(-iX) (K_{13} + K_{23}) \exp(iX) &= \\ &= \frac{1}{2\mu_{13}} p_{13}^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} p_{23}^2 + \frac{1}{m_3} p_{13} \cdot p_{23} = \\ &= \frac{1}{2\mu_{1; 2, 3}} p_r^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} p_\rho^2. \quad (3.22) \end{aligned}$$

Второе равенство здесь вытекает из формул (3.4). Положим

$$U_{23} \equiv \exp(-iX) V_{23} \exp(iX). \quad (3.23)$$

Тогда формулы (3.21) примут вид

$$\begin{aligned} (E_n - H_A^{(T)}) \exp(-iX) \Phi_{A,n} &= \\ &= (U_{23} - V_{23}(\rho)) \exp(-iX) \Phi_{A,n}, \quad (3.24) \end{aligned}$$

$$(E_n - H_C^{(T)}) \exp(-iX) \Phi_{C,n} = 0. \quad (3.25)$$

Теперь запишем в T -координатах вторую формулу (3.16). Выполняя преобразование, обратное преобразованию (2.8), получаем

$$\exp(-iX) [(K_{13} + V_{13}) + K_{23}] \exp(iX) \exp(-iX) \Phi_{B,n} = \\ = E_n \exp(-iX) \Phi_{B,n}. \quad (3.26)$$

Пользуясь соотношением

$$\exp(-iX) (K_{13} + K_{23}) \exp(iX) = \frac{1}{2\mu_{2;1,3}} p_{r'}^2 + \frac{1}{2\mu_{13}} p_{\rho'}^2, \quad (3.27)$$

вытекающим из формулы (3.10), перепишем формулу (3.26) в виде

$$(E_n - H_B^{(T)}) \exp(-iX) \Phi_{B,n} = \\ = (U_{13} - V_{13}(\rho')) \exp(-iX) \Phi_{B,n}. \quad (3.28)$$

Здесь принято

$$U_{13} \equiv \exp(-iX) V_{13} \exp(iX). \quad (3.29)$$

Сравнивая формулы (3.24) и (3.28) с формулами (3.5) и (3.11), приходим к соотношениям

$$\exp(-iX) \Phi_{A,n}^{(\pm)} = \\ = \left\{ 1 + \frac{1}{E_n - [K(\mathbf{r}, \rho) + U_{23}] \pm i\varepsilon} [U_{23} - V_{23}(\rho)] \right\} \phi_{A,n}(\mathbf{r}, \rho), \\ \exp(-iX) \Phi_{B,n}^{(\pm)} = \left\{ 1 + \frac{1}{E_n - [K(\mathbf{r}', \rho') + U_{13}] \pm i\varepsilon} \times \right. \\ \left. \times [U_{13} - V_{13}(\rho')] \right\} \phi_{B,n}(\mathbf{r}', \rho'). \quad (3.30)$$

Сравнивая же формулы (3.6) и (3.25), получаем для канала C

$$\exp(-iX) \Phi_{C,n} = \phi_{C,n}(\mathbf{r}, \rho). \quad (3.31)$$

Умножая формулу (3.18) слева на $\exp(-iX)$ и подставляя в нее первую формулу (3.30) и формулу

(3.23), получаем

$$\begin{aligned}
 \Psi_{A,n}^{T,(\pm)} &\equiv \exp(-iX) \Psi_{A,n}^{(\pm)} = \\
 &= \exp(-iX) \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\varepsilon} (\bar{V}_{13} + \bar{V}_{23} - V_{23} + \bar{V}_{12}) \right] \times \\
 &\quad \times \exp(iX) \exp(-iX) \Phi_{A,n} = \\
 &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\varepsilon} (V_{13} + V_{23} + V_{12} - U_{23}) \right] \times \\
 &\quad \times \exp(-iX) \Phi_{A,n} = \\
 &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\varepsilon} (V_{13} + V_{23} + V_{13} - U_{23}) \right] \times \\
 &\quad \times \left[1 + \frac{1}{E_n - (K(\mathbf{r}, \rho) + U_{23}) \pm i\varepsilon} (U_{23} - V_{23}) \right] \phi_{A,n}(\mathbf{r}, \rho) = \\
 &= \left\{ 1 + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\varepsilon} [V_{13}(\mathbf{r}, \rho) + V_{12}(\mathbf{r}, \rho)] \right\} \phi_{A,n}(\mathbf{r}, \rho),
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

где H_c — гамильтониан, определенный формулой (3.3), а при выводе последнего равенства применена формула (2.28) из гл. 2. Совершенно аналогично для канала B получим формулу

$$\begin{aligned}
 \Psi_{B,n}^{T,(\pm)} &\equiv \exp(-iX) \Psi_{B,n}^{(\pm)} = \\
 &= \left\{ 1 + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\varepsilon} [V_{23}(\mathbf{r}', \rho') + V_{12}(\mathbf{r}', \rho')] \right\} \phi_{B,n}(\mathbf{r}', \rho'),
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

в которой H_c — гамильтониан, даваемый формулой (3.9). Для канала C получим следующий результат:

$$\begin{aligned}
 \Psi_{C,n}^{T,(\pm)} &\equiv \exp(-iX) \Psi_{C,n}^{(\pm)} = \\
 &= \left\{ 1 + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\varepsilon} [V_{13}(\mathbf{r}, \rho) + V_{23}(\rho) + V_{12}(\mathbf{r}, \rho)] \right\} \phi_{C,n}(\mathbf{r}, \rho).
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Наконец, рассмотрим канал D . В этом случае волновая функция асимптотического состояния $\Phi_{D,n}$ определена решением уравнения (2.55)

$$(K_{13} + K_{23} + \bar{V}_{12}) \Phi_{D,n} = E_n \Phi_{D,n}. \tag{3.35}$$

Выполним преобразование, обратное преобразованию (2.8), пользуясь формулой (3.14):

$$\begin{aligned} \exp(-iX)(K_{13} + K_{23} + \bar{V}_{12}) \exp(iX) &= \\ &= \frac{1}{2\mu_{13}} \mathbf{p}_{13}^2 + \frac{1}{2\mu_{23}} \mathbf{p}_{23}^2 + \frac{1}{m_3} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23} + V_{12} = \\ &= \frac{1}{2\mu_{3; 1, 2}} \mathbf{P}_R^2 + \frac{1}{2\mu_{12}} \mathbf{p}_{12}^2 + V_{12}(\mathbf{r}_{12}) = H_D^{(T)}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Тогда оказывается, что уравнение (3.35) можно преобразовать к виду

$$H_D^{(T)} \exp(-iX) \varphi_{D, n} = E_n \exp(-iX) \varphi_{D, n}. \quad (3.37)$$

Сравнивая полученное уравнение с уравнением (3.13), замечаем, что

$$\varphi_{D, n}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}) = \exp(-iX) \varphi_{D, n}(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}). \quad (3.38)$$

Действуя на волновую функцию $\Psi_{D, n}^{(\pm)}$ [формула (2.54)] слева оператором $\exp(-iX)$, получаем

$$\begin{aligned} \Psi_{D, n}^{(T, (\pm))} &\equiv \exp(-iX) \Psi_{D, n}^{(\pm)} = \\ &= \exp(-iX) \left[1 + \frac{1}{E_n - H \pm i\epsilon} (\bar{V}_{13} + \bar{V}_{23}) \right] \times \\ &\quad \times \exp(iX) \exp(-iX) \varphi_{D, n} = \\ &= \left[1 + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\epsilon} (V_{13} + V_{23}) \right] \varphi_{D, n}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}), \end{aligned} \quad (3.39)$$

где H_c — гамильтониан, выражаемый формулой

$$\begin{aligned} H_c &= \frac{1}{2\mu_{3; 1, 2}} \mathbf{P}_R^2 + \frac{1}{2\mu_{12}} \mathbf{p}_{12}^2 + \\ &\quad + V_{12}(\mathbf{r}_{12}) + V_{13}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}) + V_{23}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{12}). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Достаточно подробные вычисления, проведенные выше, ясно показывают, что волновая функция $\Psi_{N, n}^{(\pm)}$ ($N = A, B, C, D$) состояния рассеяния в V -координатах переводится преобразованием $\exp(-iX)$ в волновую функцию $\Psi_{N, n}^{T, (\pm)}$, построенную из начальных (или конечных) состояний в T -координатах, выбранных по-разному в разных каналах. Иными словами, волновые

функции $\Psi_{N,n}^{T,(\pm)}$ состояний рассеяния для каждого T -координат связаны с волновыми функциями $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$ состояний рассеяния в V -координатах унитарным преобразованием

$$\Psi_{N,n}^{T,(\pm)} = \exp(-iX) \Psi_{N,n}^{(\pm)}(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{r}_{23}). \quad (3.41)$$

Если формулы (1.13) и (1.14) переписать в T -координатах, соответствующих каждому каналу, и сравнить полученные выражения с выражениями (3.32) — (3.34) и (3.39), то можно заметить их полное совпадение. Это значит, что из соотношения (3.41) можно вывести следующее важное заключение:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{M,m}^{T,(\pm)} | \Psi_{N,n}^{T,(\pm)} \rangle &= \langle \Psi_{M,m}^{(\pm)} | \exp(iX) \exp(-iX) | \Psi_{N,n}^{(\pm)} \rangle = \\ &= \langle \Psi_{M,m}^{(\pm)} | \Psi_{N,n}^{(\pm)} \rangle = \delta_{M,N} \delta_{m,n} \quad (M, N = A, B, C, D). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Последнее равенство здесь основано на формулах (2.43), (2.70) и (2.71). Иными словами, волновые функции $\Psi_{N,n}^{(\pm)}$, выраженные в соответствующих T -координатах, ортонормированы. Именно это соотношение ортонормированности принято в качестве допущения в формуле (1.19). Подчеркнем, что соотношение нормированности в T -координатах [формула (3.42)] доказано нами кружным путем, путем перехода к V -координатам. Если же не переходить к V -координатам, а сразу рассматривать волновые функции состояний рассеяния в T -координатах, определенных по-разному в разных каналах, то доказать указанное соотношение ортонормированности не представляется возможным.

В заключение данного параграфа рассмотрим S -матрицу в T -координатах. Пользуясь формулами (2.76) и (3.42), получаем

$$\begin{aligned} S_{M,f;N,i} &= \langle \Psi_{M,f}^{(-)} | \Psi_{N,i}^{(+)} \rangle = \\ &= \langle \Psi_{M,f}^{T,(-)} | \exp(-iX) \cdot \exp(iX) | \Psi_{N,i}^{T,(+)} \rangle = \\ &= \langle \Psi_{M,f}^{T,(-)} | \Psi_{N,i}^{T,(+)} \rangle, \end{aligned} \quad (3.43)$$

Собрав вместе формулы (3.5), (3.6), (3.11) и (3.13), представим их в виде

$$H_N^{(T)} \phi_{N,n} = E_n \phi_{N,n}. \quad (3.44)$$

Введем разбиение гамильтониана

$$H_c = H_N^{(T)} + V_N. \quad (3.45)$$

Объединяя результаты (3.32) — (3.34) и формулу (3.29), получаем

$$\Psi_{N,n}^{T,(\pm)} = \left(1 + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\epsilon} V_N \right) \phi_{N,n}, \quad (3.46)$$

откуда вытекает, что

$$\Psi_{M,m}^{T,(-)} - \Psi_{M,m}^{T,(+)} = 2\pi i \delta(E_m - H_c) V_M \phi_{M,m}. \quad (3.47)$$

Подставляя последнюю формулу в выражение (3.43) и учитывая условия (3.42), приходим к результату

$$\begin{aligned} S_{M,f;N,i} &= \langle \Psi_{M,f}^{T,(+)} | \Psi_{N,i}^{T,(+)} \rangle - \\ &\quad - 2\pi i \langle \phi_{M,f} | V_M \delta(E_f - H_c) | \Psi_{N,i}^{T,(+)} \rangle = \\ &= \delta_{M,N} \delta_{f,i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \phi_{M,f} | V_M | \Psi_{N,i}^{T,(+)} \rangle, \end{aligned} \quad (3.48)$$

который можно представить в виде

$$S_{M,f;N,i} = \delta_{M,N} \delta_{f,i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \Psi_{M,f}^{T,(-)} | V_N | \phi_{N,i} \rangle. \quad (3.49)$$

Формальные выражения (1.17) и (1.18) представлены здесь в виде строго доказанных формул (3.48) и (3.49). Далее, если полную систему собственных функций гамильтониана H (2.82) путем унитарного преобразования $\exp(-iX)$ перевести в систему собственных функций гамильтониана H_c

$$\{ \Psi_{0,n}^T, \Psi_{A,n}^{T,(\pm)}, \Psi_{B,n}^{T,(\pm)}, \Psi_{C,n}^{T,(\pm)}, \Psi_{D,n}^{T,(\pm)} \}, \quad (3.50)$$

то ясно, что полученная система функций будет тоже полной и ортонормированной. Здесь $\Psi_{0,n}^{(T)} \equiv \exp(-iX) \Psi_{0,n}$. Следовательно, выполняется соотношение

$$\sum_l \sum_{L=A,B,C,D} \langle \Psi_{M,m}^{T,(+)} | \Psi_{L,l}^{T,(-)} \rangle \langle \Psi_{L,l}^{T,(-)} | \Psi_{N,n}^{T,(+)} \rangle = \delta_{M,N} \delta_{m,n}, \quad (3.51)$$

соответствующее формуле (2.84). Подставляя сюда выражение (3.48), выводим оптическую теорему в T -координатах для случая, когда начальное состояние принадлежит каналу A :

$$\sum_f \left\{ \omega_{A, f; A, i} + \sum_{L=B, C, D} \omega_{L, f; A, i} \right\} = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} T_{A_i, A, i}. \quad (3.52)$$

$$\omega_{L, f; A, i} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) \langle \phi_{L, f} | V_L | \Psi_{A, i}^{T, (+)} \rangle|^2. \quad (3.53)$$

§ 4. Метод Фаддеева

В предыдущем параграфе мы показали, пользуясь T -координатами в каждом канале, что волновая функция состояния рассеяния дается формулой (3.46). Соответствующее этой формуле интегральное уравнение типа Липпмана — Швингера

$$\Psi_{N, n}^{T, (\pm)} = \phi_{N, n} + \frac{1}{E_n - H_N^{(T)} \pm i\epsilon} V_N \Psi_{N, n}^{T, (\pm)} \quad (4.1)$$

не дает правильного описания конечных состояний во всех каналах рассеяния. Кроме того, решение этого уравнения определено неоднозначно. Отмеченные недостатки можно связать с отсутствием сходимости процесса последовательных приближений для уравнения (4.1). Вычислить же волновую функцию непосредственно по формуле (3.46) практически невозможно. Тем не менее оказывается, что путем подходящего преобразования формулы (3.46) можно вывести новое интегральное уравнение, правильно отражающее граничные и асимптотические условия во всех каналах рассеяния, для которого гарантирована сходимость процесса последовательных приближений. Решение этой задачи дает метод Фаддеева.

А. Недостатки уравнения Липпмана—Швингера

Прежде чем отбрасывать интегральное уравнение (4.1) и браться за построение нового метода, попробуем понять причину неоднозначности решения этого

уравнения. Это поможет нам найти путеводную нить вывода нового интегрального уравнения. Рассмотрим например, рассеяния в канале C . Формула (3.45) для канала C имеет вид

$$H_c = H_C^{(T)} + V_C; \quad V_C = V_{12} + V_{23} + V_{31}, \quad (4.2)$$

а S -матрица [с учетом формул (3.48) и (3.46)] — вид

$$\begin{aligned} S_{C, f; C, i} &= \delta_{f, i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \phi_{C, f} | V_C | \Psi_{C, i}^{(+)} \rangle = \\ &= \delta_{f, i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \phi_{C, f} | V_C + V_C \frac{1}{E_i - H_c \pm i\epsilon} V_C | \phi_{C, i} \rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Введем оператор $T_C(z)$, зависящий от произвольного комплексного числа z :

$$T_C(z) = V_C + V_C \frac{1}{z - H_c} V_C. \quad (4.4)$$

Он удовлетворяет интегральному уравнению

$$T_C(z) = V_C + V_C \frac{1}{z - H_C^{(T)}} T_C(z). \quad (4.5)$$

Найдя решение этого уравнения и подставив его в формулу (4.3), определим элементы S -матрицы. Так как уравнение (4.5) по существу совпадает с уравнением Липпмана — Швингера (4.1), все недостатки последнего должны быть присущи также и уравнению (4.5). Поэтому вместо свойств уравнения (4.1) рассмотрим свойства уравнения (4.5).

Решение уравнения (3.6)

$$H_C^{(T)} \phi_{C, n}(\mathbf{r}, \rho) = E_n \phi_{C, n}(\mathbf{r}, \rho)$$

имеет вид

$$\phi_{C, \rho}(\mathbf{r}, \rho) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{p}_r \cdot \mathbf{r}) \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(\mathbf{p}_\rho \cdot \rho), \quad (4.6)$$

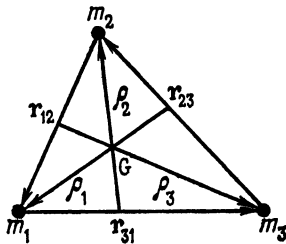
где $\rho = (\mathbf{p}_r, \mathbf{p}_\rho)$ — квантовое c -число, характеризующее состояние. Переходя в условии нормировки волновой функции (4.6) к пределу континуума¹⁾ и вводя обо-

¹⁾ То есть к пределу при $L \rightarrow \infty$. — Прим. перев.

значения $\rho \equiv r_{23}$, $r \equiv \rho_1$, $\rho_\rho \equiv p_{23}$, $\rho_r = p_1$, запишем волновую функцию (4.6) в виде

$$\phi_{C, p} \equiv u(p_{23})u(p_1) = \frac{1}{(2\pi)^3} \exp(ip_{23} \cdot r_{23}) \exp(ip_1 \cdot \rho_1). \quad (4.7)$$

Отметим, что в формуле (4.7) символ p_{23} имеет иной смысл, нежели в формулах (2.3) и (3.2). Пользуясь



Фиг. 42. Плоские волны в канале.

переменными, показанными на фиг. 42, запишем рассматриваемую волновую функцию в следующих формах:

$$\begin{aligned} \phi_{C, p} &\equiv u(p_{31})u(p_2) = \frac{1}{(2\pi)^3} \exp(ip_{31} \cdot r_{31}) \exp(ip_2 \cdot \rho_2), \\ \phi_{C, p} &\equiv u(p_{12})u(p_3) = \frac{2}{(2\pi)^3} \exp(ip_{12} \cdot r_{12}) \exp(ip_3 \cdot \rho_3). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Вычисляя на основании введенных волновых функций первое борновское приближение для уравнения (4.5), получаем

$$\begin{aligned} \langle \phi_{C, p'} | (V_{12} + V_{23} + V_{31}) | \phi_{C, p} \rangle &= \\ &= \delta^3(p_3 - p'_3) \langle u(p'_{12}) | V_{12} | u(p_{12}) \rangle + \\ &+ \delta^3(p_1 - p'_1) \langle u(p'_{23}) | V_{23} | u(p_{23}) \rangle + \\ &+ \delta^3(p_2 - p'_2) \langle u(p'_{31}) | V_{31} | u(p_{31}) \rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

На фиг. 43, а показаны фейнмановские диаграммы для членов этой формулы. Изолированные линии на фиг. 43, а соответствуют членам, содержащим δ -функ-

ции. Второе борновское приближение дается формулой

$$\begin{aligned} \langle \phi_{C, p'} | V_C \frac{1}{z - H_C^{(T)}} V_C | \phi_{C, p} \rangle = \\ = \delta^3(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}'_3) \langle u(\mathbf{p}'_{12}) | V_{12} \frac{1}{z - \mathbf{p}_3^2/2\mu_{3;1,2} - \mathbf{p}_{12}^2/2\mu_{12}} V_{12} | u(\mathbf{p}_{12}) \rangle + \\ + \delta^3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) \langle u(\mathbf{p}'_{23}) | V_{23} \frac{1}{z - \mathbf{p}_1^2/2\mu_{1;2,3} - \mathbf{p}_{23}^2/2\mu_{23}} V_{23} | u(\mathbf{p}_{23}) \rangle + \\ + \delta^3(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2) \langle u(\mathbf{p}'_{31}) | V_{31} \frac{1}{z - \mathbf{p}_2^2/2\mu_{2;3,1} - \mathbf{p}_{31}^2/2\mu_{31}} V_{31} | u(\mathbf{p}_{31}) \rangle + \\ + \langle \phi_{C, p'} | V_{12} \frac{1}{z - H_C^{(T)}} V_{23} | \phi_{C, p} \rangle + \dots \quad (4.10) \end{aligned}$$

Первые три члена этого выражения показаны на фиг. 43, б, а четвертый — на фиг. 43, в. Частицы, не взаимодействующие с остальными, показаны на фиг. 43, а и б изолированными линиями. В процессе, изображенном на фиг. 43, в, изолированных линий нет (все частицы взаимодействуют). Появление процессов без взаимодействия указывает на математическую некорректность уравнения (4.5) и соответствующего ему уравнения Липпмана — Швингера (4.1).

В общем случае для единственности решения интегрального уравнения и сходимости процесса последовательных приближений необходимо, чтобы ядро уравнения было ядром Гильберта — Шмидта (или класса L^2). Это означает следующее. Представим уравнение (4.5) в виде уравнения для матричных элементов по полной системе волновых функций $\phi_{C, l}$:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{C, m} | T_C(z) | \phi_{C, n} \rangle = \langle \phi_{C, m} | V_C | \phi_{C, m} \rangle + \\ + \sum_l \frac{\langle \phi_{C, m} | V_C | \phi_{C, l} \rangle \langle \phi_{C, l} | T_C(z) | \phi_{C, n} \rangle. \quad (4.11) \end{aligned}$$

Тогда сумма квадратов модулей ядер

$$\sum_{l, m} \left| \frac{\langle \phi_{C, m} | V_C | \phi_{C, l} \rangle}{z - E_l} \right|^2 \quad (4.12)$$

должна быть ограниченной. В нашем случае ядро имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\langle \phi_C, \mathbf{p}' | V_C(z) | \phi_C, \mathbf{p} \rangle}{z - E_p} &= \delta^3(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}'_3) \frac{\langle u(\mathbf{p}'_{12}) | V_{12} | u(\mathbf{p}_{12}) \rangle}{z - E_p} + \\ &+ \delta^3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) + \frac{\langle u(\mathbf{p}'_{23}) | V_{23} | u(\mathbf{p}_{23}) \rangle}{z - E_p} + \\ &+ \delta^3(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2) \frac{\langle u(\mathbf{p}'_{31}) | V_{31} | u(\mathbf{p}_{31}) \rangle}{z - E_p}, \quad (4.13) \end{aligned}$$

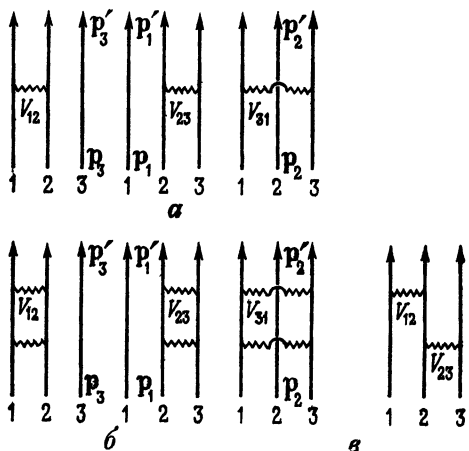
показывающий, что некоторые слагаемые суммы (4.12) содержат члены

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{p}_{23} \cdot d^3\mathbf{p}'_{23} \int d^3\mathbf{p}_1 \cdot d^3\mathbf{p}'_1 \frac{[\delta^3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1)]^2}{(z - E_p)^2} |u(\mathbf{p}'_{23}) | V_{23} | u(\mathbf{p}_{23})|^2 = \\ = \delta^3(0) \int d^3\mathbf{p}_{23} \cdot d^3\mathbf{p}'_{23} \int d^3\mathbf{p}_1 \frac{|\langle u(\mathbf{p}'_{23}) | V_{23} | u(\mathbf{p}_{23}) \rangle|^2}{(z - E_p)^2}, \quad (4.14) \end{aligned}$$

очевидно, расходящиеся из-за множителя $\delta^3(0)$. Следовательно, ядро уравнения (4.11) не принадлежит классу L^2 . Наличие δ -функций, вызывающих расходимость ядра, на диаграммах фиг. 43 соответствует появлению изолированных линий. Когда все три частицы связаны взаимодействием, например, так, как показано на фиг. 43, в, δ -функции не возникают. Иначе говоря, причина неоднозначности решения интегрального уравнения (4.11) кроется в том, что оно допускает процессы без взаимодействия. Это же вызывает расходимость процедуры последовательных приближений.

Если в системе двух частиц обозначить символом \mathbf{g}_{12} вектор их относительных координат, а символом \mathbf{p}_3 — радиус-вектор центра масс, то окажется, что ядро интегрального уравнения для величины T_z в этой системе примет вид первого члена в выражении (4.13). Выделением движения центра масс устраняется из ядра множитель $\delta^3(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}'_3)$. Если потенциал взаимодействия двух частиц V_{12} достаточно быстро убывает с расстоянием, то ядро интегрального уравнения,

возникающего после выделения движения центра масс, принадлежит классу L^2 . Решение соответствующего



Фиг. 43. Борновское приближение в системе трех тел.
а—первое; б—второе; в—третье.

щего интегрального уравнения Липпмана — Швингера определяется однозначно.

Б. Метод Фаддеева

Выше мы указали на процессы без взаимодействия как на источник несовершенств интегрального уравнения Липпмана — Швингера. Фаддеев предложил метод устранения указанного недостатка. Вообще говоря, определение (3.46) можно записать в виде

$$\Psi_{N, n}^{T, (\pm)} = [1 + G(E_n + i\epsilon) V_N] \phi_{N, n}, \quad (4.15)$$

где

$$G(z) \equiv \frac{1}{z - H_C}. \quad (4.16)$$

Тогда

$$\begin{aligned} T_{M, f; N, i} &\equiv \langle \phi_{M, f} | V_M | \Psi_{N, i}^{T, (\pm)} \rangle = \\ &= \langle \phi_{M, f} | V_M + V_M G(E_i + i\epsilon) V_N | \phi_{N, i} \rangle. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Величина, даваемая формулой (4.17), имеет смысл элемента S -матрицы (3.48). Выбрав подходящие T -координаты, представим гамильтониан H_c [формула (2.7)] в виде

$$H_c = H_C^{(T)} + V_C; \quad V_C = V_{12} + V_{23} + V_{31} \quad (4.18)$$

и введем оператор

$$G_0(z) \equiv \frac{1}{z - H_C^{(T)}}. \quad (4.19)$$

Пользуясь формулой (2.28) из гл. 2, можно вывести тождество

$$\begin{aligned} \frac{1}{z - H_c} &= \frac{1}{z - H_C^{(T)}} + \frac{1}{z - H_C^{(T)}} V_C \frac{1}{z - H_c} = \\ &= \frac{1}{z - H_C^{(T)}} + \frac{1}{z - H_C^{(T)}} V_C \left[\frac{1}{z - H_C^{(T)}} + \frac{1}{z - H_c} V_C \frac{1}{z - H_C^{(T)}} \right] = \\ &= \frac{1}{z - H_C^{(T)}} + \frac{1}{z - H_C^{(T)}} \left[V_C + V_C \frac{1}{z - H_c} V_C \right] \frac{1}{z - H_C^{(T)}}, \end{aligned}$$

эквивалентное соотношениям

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z) T(z) G_0(z), \quad (4.20)$$

$$T(z) = V_C + V_C \frac{1}{z - H_c} V_C = V_C + V_C \frac{1}{z - H_C^{(T)}} T(z). \quad (4.21)$$

Таким образом, решив уравнение (4.21) относительно $T(z)$ и подставив результат в уравнение (4.20), можно найти $G(z)$, а затем и матричный элемент (4.17). Пока мы не сказали ничего нового.

Чтобы найти $T(z)$ из уравнения (4.21), введем операторы T_{12} , T_{23} , T_{31} :

$$\begin{aligned} T_{12}(z) &\equiv V_{12} + V_{12} G_0(z) T(z), \\ T_{23}(z) &\equiv V_{23} + V_{23} G_0(z) T(z), \\ T_{31}(z) &\equiv V_{31} + V_{31} G_0(z) T(z). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Очевидно, что

$$T(z) = T_{12}(z) + T_{23}(z) + T_{31}(z). \quad (4.23)$$

Кроме того, введем операторы, описывающие процессы рассеяния пар взаимодействующих частиц:

$$\begin{aligned} t_{12}(z) &\equiv V_{12} + V_{12}G_0(z)t_{12}(z) = V_{12} + t_{12}(z)G_0(z)V_{12}, \\ t_{23}(z) &\equiv V_{23} + V_{23}G_0(z)t_{23}(z) = V_{23} + t_{23}(z)G_2(z)V_{23}, \\ t_{31}(z) &\equiv V_{31} + V_{31}G_0(z)t_{31}(z) = V_{31} + t_{31}(z)G_0(z)V_{31}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Исключим из формулы (4.22) потенциалы V_{12} и т. д. Например, оператор $T_{12}(z)$ перепишем в виде

$$\begin{aligned} T_{12}(z) &= [t_{12}(z) - t_{12}(z)G_0(z)V_{12}] + \\ &\quad + [t_{12}(z) - t_{12}(z)G_0(z)V_{12}]G_0(z)T(z) = \\ &= t_{12}(z) + t_{12}(z)G_0(z)T(z) - t_{12}(z)(V_{12} + V_{12}G_0(z)T(z)) = \\ &= t_{12}(z) + t_{12}(z)G_0(z)[T(z) - T_{12}(z)] = \\ &= t_{12}(z) + t_{12}(z)G_0(z)[T_{23}(z) + T_{31}(z)]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

При выводе первого равенства здесь использована формула (4.24), третьего — (4.22), а последнего — (4.23). Совершенно так же получим

$$\begin{aligned} T_{23}(z) &= t_{23}(z) + t_{23}(z)G_0(z)[T_{31}(z) + T_{12}(z)], \\ T_{31}(z) &= t_{31}(z) + t_{31}(z)G_0(z)[T_{12}(z) + T_{23}(z)]. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Объединив результаты (4.25) и (4.26) и представив их в матричной форме, придем к уравнению

$$\begin{pmatrix} T_{12} \\ T_{23} \\ T_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{12} \\ t_{23} \\ t_{31} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & t_{12} & t_{12} \\ t_{23} & 0 & t_{23} \\ t_{31} & t_{31} & 0 \end{pmatrix} G_0 \begin{pmatrix} T_{12} \\ T_{23} \\ T_{31} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

называемому *уравнением Фаддеева*. Оно заменяет интегральное уравнение (4.21). Решая систему интегральных уравнений (4.27) и составляя сумму полученных решений (4.23), можно определить $T(z)$.

В п. «А» мы указывали, что при разложении в ряд решения интегрального уравнения для $T(z)$ [формула (4.21)] возникают члены без взаимодействия (несвязные графы), обуславливающие расходимость процесса последовательных приближений. При разложении же

решения уравнения (4.27) в ряд по $t_{i,j}$ несвязные графы не возникают. В самом деле,

$$T_{12}(z) = t_{12}(z) + t_{12}(z) G_0(z) t_{23}(z) + \\ + t_{12}(z) G_0(z) t_{31}(z) + \dots \quad (4.28)$$

В этом разложении не появляются члены вида

$$t_{12}(z) G_0(z) t_{12}(z).$$

Во втором и последующих членах разложения (4.28) не возникают δ -функции, а следовательно, ядро интегрального уравнения (4.25) соответствует потенциалу, достаточно быстро убывающему с увеличением расстояния, и принадлежит классу L^2 . Чтобы показать это, вычислим матричный элемент (4.28). Взяв матричный элемент в канале C , получим с учетом формул (4.8)

$$\langle \phi_{C, p'} | T_{12}(z) | \phi_{C, p} \rangle = \delta^3(p'_3 - p_3) \langle u(p'_{12}) | t_{12}(z) | u(p_{12}) \rangle + \\ + \langle u(p'_{13}) u(p'_3) | t_{12}(z) G_0(z) t_{23}(z) | u(p_{23}) u(p_1) \rangle + \dots$$

Если подставить сюда полную систему функций $\{\phi_{C, p''}\}$, то с учетом формул (4.7) и (4.8) можно написать

$$\phi_{C, p''} = u(p''_{12}) u(p''_3) = u(p''_{23}(p''_{12}, p''_3)) u(p''_1(p''_{12}, p''_3)).$$

Тогда

$$\langle \phi_{C, p'} | T_{12}(z) | \phi_{C, p} \rangle = \delta^3(p'_3 - p_3) \langle u(p'_{12}) | t_{12}(z) | u(p_{12}) \rangle + \\ + \int d^3 p''_{12} \circ d^3 p''_3 \delta^3(p'_3 - p''_3) \langle u(p'_{12}) | t_{12}(z) | u(p''_{12}) \rangle \times \\ \times (z - E_{p''})^{-1} \delta^3(p''_1(p''_{12}, p''_3) - p_1) \times \\ \times \langle u(p''_{23}) | t_{23}(z) | u(p_{23}) \rangle + \dots \quad (4.29)$$

Очевидно, что δ -функции во втором члене пропадают при взятии интегралов по p''_3 и p''_{12} .

Далее, так как здесь отделено движение центра масс, члены, соответствующие взаимному рассеянию двух частиц, например t_{12} , тоже не дают δ -функций. В первом члене выражения (4.29) δ -функция имеется,

но это неоднородный член интегрального уравнения (4.25), а следовательно, δ -функция этого члена не связана с интегральным ядром задачи рассеяния. То же самое можно сказать и об уравнениях (4.26). Следовательно, в отличие от интегрального уравнения (4.21) решение системы интегральных уравнений (4.27) определено однозначно, а процесс последовательных приближений сходится.

Вернемся к задаче определения оператора $T(z)$ (4.21), введенного для вычисления матричных элементов (4.17). Выясним, как определяется $T(z)$ методом Фаддеева. С этой целью рассмотрим на примере канала A метод определения волновой функции $\Psi_{A,n}^{T,(\pm)}$ (4.15). Из формул (4.15) и (4.18) вытекает, что она удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(E_n - H_C^{(T)}) \Psi_{A,n}^{T,(\pm)} = V_C \Psi_{A,n}^{T,(\pm)}. \quad (4.30)$$

Введем разбиение

$$\Psi_{A,n}^{T,(\pm)} \equiv \psi_{12,n}^{(\pm)} + \psi_{23,n}^{(\pm)} + \psi_{31,n}^{(\pm)} \quad (4.31)$$

и напишем систему интегральных уравнений для отдельных слагаемых $\psi_{12,n}^{(\pm)}$ и т. д.

$$\begin{aligned} (E_n - H_C^{(T)} - V_{12}) \psi_{12,n}^{(\pm)} &= V_{12} (\psi_{23,n}^{(\pm)} + \psi_{31,n}^{(\pm)}), \\ (E_n - H_C^{(T)} - V_{23}) \psi_{23,n}^{(\pm)} &= V_{23} (\psi_{31,n}^{(\pm)} + \psi_{12,n}^{(\pm)}), \\ (E_n - H_C^{(T)} - V_{31}) \psi_{31,n}^{(\pm)} &= V_{31} (\psi_{12,n}^{(\pm)} + \psi_{23,n}^{(\pm)}). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Ясно, что сумма этих трех уравнений даст уравнение (4.30) для $\Psi_{A,n}^{T,(\pm)}$ (4.31). Учитывая, что начальное (или конечное) состояние в канале A дается функциями $\phi_{A,n}$ (3.5), систему (4.32) можно переписать в виде системы интегральных уравнений

$$\begin{aligned} \psi_{12,n}^{(\pm)} &= G_{12} V_{12} (\psi_{23,n}^{(\pm)} + \psi_{31,n}^{(\pm)}), \\ \psi_{23,n}^{(\pm)} &= \phi_{A,n} + G_{23} V_{23} (\psi_{31,n}^{(\pm)} + \psi_{12,n}^{(\pm)}), \\ \psi_{31,n}^{(\pm)} &= G_{31} V_{31} (\psi_{12,n}^{(\pm)} + \psi_{23,n}^{(\pm)}), \end{aligned} \quad (4.33)$$

где, например, G_{12} дается выражением

$$G_{12}(E_n \pm i\epsilon) = \frac{1}{E_n - (H_C^{(T)} + V_{12}) + i\epsilon} \quad (4.34)$$

и удовлетворяет интегральному уравнению

$$G_{12} = G_0 + G_0 V_{12} G_{12}. \quad (4.35)$$

Ниже всюду, где это не приведет к недоразумению, мы не будем в явном виде указывать, что G_0 — функция переменной z или $E_n \pm i\epsilon$. Согласно определениям (4.19), (4.24) и (4.34), выполняется соотношение

$$\begin{aligned} G_0 t_{12} &= \frac{1}{z - H_C^{(T)}} \left(V_{12} + V_{12} \frac{1}{z - (H_C^{(T)} + V_{12})} V_{12} \right) = \\ &= \frac{1}{z - H_C^{(T)}} \left(1 + V_{12} \frac{1}{z - (H_C^{(T)} + V_{12})} \right) V_{12} = \\ &= \frac{1}{z - (H_C^{(T)} + V_{12})} V_{12} = G_{12} V_{12}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

на основании которого мы представим систему (4.33) в виде

$$\begin{aligned} \psi_{12, n}^{(\pm)} &= G_0 t_{12} (\psi_{23, n}^{(\pm)} + \psi_{31, n}^{(\pm)}), \\ \psi_{23, n}^{(\pm)} &= \phi_{A, n} + G_0 t_{23} (\psi_{31, n}^{(\pm)} + \psi_{12, n}^{(\pm)}), \\ \psi_{31, n}^{(\pm)} &= G_0 t_{31} (\psi_{12, n}^{(\pm)} + \psi_{23, n}^{(\pm)}) \end{aligned} \quad (4.37)$$

или, в матричной форме,

$$\begin{pmatrix} \psi_{12, n}^{(\pm)} \\ \psi_{23, n}^{(\pm)} \\ \psi_{31, n}^{(\pm)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_{A, n} \\ 0 \end{pmatrix} + G_0 \begin{pmatrix} 0 & t_{12} & t_{12} \\ t_{23} & 0 & t_{23} \\ t_{31} & t_{31} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{12, n}^{(\pm)} \\ \psi_{23, n}^{(\pm)} \\ \psi_{31, n}^{(\pm)} \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

Полученное матричное уравнение называют уравнением Фаддеева для волновой функции. Чтобы сравнить его с уравнением Липпмана — Швингера, рассмотрим несколько подробнее систему уравнений (4.37). Под-

ставив в формулы (4.33) выражения типа (4.35), в которые входит G_0 , получим

$$\begin{aligned}\psi_{12, n}^{(\pm)} &= (G_0 + G_0 V_{12} G_{12}) V_{12} (\psi_{23, n}^{(\pm)} + \psi_{31, n}^{(\pm)}) = \\ &= G_0 V_{12} (\psi_{23, n}^{(\pm)} + \psi_{31, n}^{(\pm)}) + G_0 V_{12} G_{12} V_{12} (\psi_{23, n}^{(\pm)} + \psi_{31, n}^{(\pm)}) = \\ &= G_0 V_{12} [\psi_{23, n}^{(\pm)} + \psi_{31, n}^{(\pm)} + \psi_{12, n}^{(\pm)}] = G_0 V_{12} \Psi_{A, n}^T(\pm).\end{aligned}\quad (4.39)$$

При выводе третьего из равенств (4.39) нужно воспользоваться уравнениями (4.33), а при выводе последнего — соотношением (4.31). Совершенно так же получим

$$\psi_{31, n}^{(\pm)} = G_0 V_{31} \Psi_{A, n}^T(\pm),\quad (4.40)$$

$$\begin{aligned}\psi_{23, n}^{(\pm)} &= \phi_{A, n} + (G_0 + G_0 V_{23} G_{23}) V_{23} (\psi_{31, n}^{(\pm)} + \psi_{12, n}^{(\pm)}) = \\ &= \phi_{A, n} + G_0 V_{23} (\psi_{31, n}^{(\pm)} + \psi_{12, n}^{(\pm)}) + G_0 V_{23} G_{23} V_{23} (\psi_{31, n}^{(\pm)} + \psi_{12, n}^{(\pm)}) = \\ &= (1 - G_0 V_{23}) \phi_{A, n} + G_0 V_{23} \Psi_{A, n}^T(\pm) = G_0 V_{23} \Psi_{A, n}^T(\pm).\end{aligned}\quad (4.41)$$

При выводе здесь мы воспользовались тем, что $\phi_{A, n}$ — волновая функция связанного состояния в потенциале V_{23} , удовлетворяющая уравнению

$$(1 - G_0 V_{23}) \phi_{A, n} = 0.$$

Подставляя выражения (4.39) — (4.41) в уравнение (4.33), получаем

$$\begin{aligned}\psi_{12, n}^{(\pm)} &= G_{12} V_{12} G_0 (V_{23} + V_{31}) \Psi_{A, n}^T(\pm), \\ \psi_{23, n}^{(\pm)} &= \phi_{A, n} + G_{23} V_{23} G_0 (V_{31} + V_{12}) \Psi_{A, n}^T(\pm), \\ \psi_{31, n}^{(\pm)} &= G_{31} V_{31} G_0 (V_{12} + V_{23}) \Psi_{A, n}^T(\pm).\end{aligned}\quad (4.42)$$

Взяв сумму трех интегральных уравнений (4.42), получим интегральное уравнение

$$\begin{aligned}\Psi_{A, n}^T(\pm) &= \phi_{A, n} + [G_{12} V_{12} G_0 (V_{23} + V_{31}) + \\ &+ G_{23} V_{23} G_0 (V_{31} + V_{12}) + G_{31} V_{31} G_0 (V_{12} + V_{23})] \Psi_{A, n}^T(\pm),\end{aligned}\quad (4.43)$$

заменяющее в канале A уравнение (4.1). Последнее в канале A имеет вид

$$\Psi_{A, n}^T(\pm) = \phi_{A, n} + G_{23} (V_{31} + V_{12}) \Psi_{A, n}^T(\pm).\quad (4.44)$$

Уравнение (4.44) допускает в качестве конечных состояний состояния из каналов A и C (связанные и рассеянные состояния в потенциале V_{23}) и не допускает состояний из каналов B и D . В противоположность этому три функции Грина G_{12} , G_{23} , G_{31} входят во второй член правой части уравнения (4.43) симметрично, благодаря чему конечные состояния могут принадлежать всем каналам. Кроме того, очевидно, что интегральное ядро уравнения (4.43) принадлежит классу L^2 и при последовательном разложении уравнения (4.43) не возникают члены, отвечающие свободным частицам. Уравнение (4.43) получено для канала A . Соответствующие уравнения для других каналов можно вывести аналогично.

Интегральное уравнение (4.43) — основное уравнение теории рассеяния в системе трех тел. Решают его методом последовательных приближений. Вид уравнения, однако, таков, что даже приближенное решение будет достаточно сложным. В заключение заметим, что уравнение (4.43) можно вывести, подставив выражение (4.23) в уравнение (4.20), применив соотношения (4.36) и

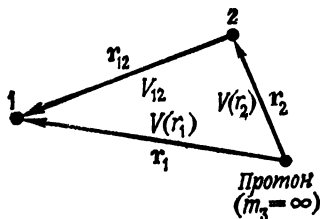
$$T_{12}G_0 = V_{12}G \quad (4.45)$$

и подставив результат в формулу (4.15).

§ 5. Рассеяние электронов на атоме водорода

В качестве примера рассеяния в системе трех тел рассмотрим упругое и неупругое рассеяние электронов на атоме водорода. Аналогичную задачу мы уже рассматривали в гл. 2, § 4, но там мы предполагали, что распределение электронов в облаке, окружающем ядро, задано, и не учитывали механических свойств электронов вне ядра. Здесь мы учтем также и квантовое движение электронов внутри атома водорода, т. е. построим более общую теорию. Поскольку масса ядра водорода (масса протона) гораздо больше массы электрона, примем приближенно, что она бесконечно велика (в процессе рассеяния протон остается неподвижным). Если протон выбрать в качестве третьей

частицы, то показанные на фиг. 41 V - и T_A -координаты совпадут друг с другом. Поэтому применим здесь теорию в V -координатах, изложенную в § 2. Ввиду условия $m_3 = \infty$ различные формулы в V -координатах очень сильно упрощаются. Прежде всего, исчезает взаимодействие $m_3^{-1} \mathbf{p}_{13} \cdot \mathbf{p}_{23}$ [формула (2.7)]. Следовательно, унитарное преобразование (2.8) становится ненужным, параметр α (2.10) обращается в нуль, а вместе с тем исчезает различие между $\bar{\mathbf{r}}_{13}$ и \mathbf{r}_{13} , $\bar{\mathbf{r}}_{23}$ и \mathbf{r}_{23} , $\bar{\mathbf{r}}_{12}$ и \mathbf{r}_{12} в формулах (2.8) и (2.13). В данном случае



Фиг. 44. Рассеяние электрона на атоме водорода.

частицы 1 и 2 — электроны с массой m . Гамильтониан (2.15) сводится к виду

$$H = H_0 + W, \quad H_0 = [K_{13} + V_{13}] + [K_{23} + V_{23}],$$

$$W = V_{12}, \quad K_{13} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}_{13}^2, \quad K_{23} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}_{23}^2.$$

Для упрощения записи введем обозначения $\mathbf{r}_1 \equiv \mathbf{r}_{13}$, $\mathbf{p}_1 \equiv \mathbf{p}_{13}$, $\mathbf{r}_2 \equiv \mathbf{r}_{23}$, $\mathbf{p}_2 \equiv \mathbf{p}_{23}$, $K_1 \equiv K_{13}$, $K_2 \equiv K_{23}$, $V = V_{13} = V_{23}$ (фиг. 44). Тогда гамильтониан системы примет вид

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V_{12}(\mathbf{r}_{12}), \\ H_0 &= [K_1 + V(r_1)] + [K_2 + V(r_2)], \end{aligned} \quad (5.1)$$

где V — потенциал кулоновского притяжения электрона и протона, а V_{12} — потенциал взаимного отталкивания электронов.

Каналу A (§ 2) теперь отвечает ситуация, когда частица 1 падающая, а частица 2 связана с ядром. Матричный элемент S -матрицы для случая, когда ко-

нечное состояние вновь принадлежит каналу A , согласно формуле (2.80), дается выражением

$$S_{A, f; A, i} = \langle \varphi_{A, f}^{(-)} | \varphi_{A, i}^{(+)} \rangle - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \varphi_{A, f}^{(-)} | V_{12} | \Psi_{A, i}^{(+)} \rangle. \quad (5.2)$$

Подставив сюда определение (2.30), напишем

$$S_{A, f; A, i} = \langle \varphi_{A, f}^{(-)} | \varphi_{A, i}^{(+)} \rangle - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \varphi_{A, f}^{(-)} | T | \varphi_{A, i}^{(+)} \rangle, \quad (5.3)$$

где

$$T \equiv T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_{12} + V_{12} \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} V_{12}. \quad (5.4)$$

Согласно определению (2.18), асимптотическое состояние $\varphi_{A, i}^{(+)}$, входящее в формулу (5.3), записывается в виде

$$\begin{aligned} \varphi_{A, i}^{(+)} &= \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2), \\ \varphi_{A, f}^{(-)} &= \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (5.5)$$

где $\varphi^{(\pm)}$ — волновая функция, которая является решением уравнения

$$[K_1 + V(\mathbf{r}_1)] \varphi^{(\pm)}(\mathbf{r}_1; E) = E \varphi^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, E), \quad E > 0 \quad (5.6)$$

для рассеянного состояния, а φ_m^B — решение уравнения

$$[K_2 + V(\mathbf{r}_2)] \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) = \mathcal{E}_m \varphi_m^B(\mathbf{r}_2), \quad \mathcal{E}_m < 0, \quad (5.7)$$

для связанного состояния.

Но в квантовой механике падающий электрон 1 неотличим от электрона 2, входящего в состав атома. Следовательно, волновую функцию¹⁾ этих двух электронов нужно симметризовать (или антисимметризовать

¹⁾ Речь идет о координатной волновой функции. Полная волновая функция двух электронов (с учетом спиновой волновой функции) антисимметрична относительно перестановки частиц. — *Прим. перев.*

вать). Поэтому напишем для асимптотического состояния (5.5)

$$\begin{aligned}\varphi_{A,i}^{(+)} \rightarrow \varphi_{A,i}^{(+),S} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \pm \\ &\quad \pm \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_2; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_1)], \\ \varphi_{A,f}^{(-)} \rightarrow \varphi_{A,f}^{(-),S} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) \pm \\ &\quad \pm \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_2; E_f - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_1)].\end{aligned}\quad (5.8)$$

Тогда матричный элемент S -матрицы (5.3) примет вид

$$\begin{aligned}\langle \varphi_{A,f}^{(-),S} | S | \varphi_{A,i}^{(+),S} \rangle &= \langle \varphi_{A,f}^{(-),S} | \varphi_{A,i}^{(+),S} \rangle - \\ &\quad - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle \varphi_{A,f}^{(-),S} | T | \varphi_{A,i}^{(+),S} \rangle.\end{aligned}\quad (5.9)$$

Рассмотрим сначала первый член выражения (5.9). Подставляя в него выражения (5.8), получаем

$$\begin{aligned}\langle \varphi_{A,f}^{(-),S} | \varphi_{A,i}^{(+),S} \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_2; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_1) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_2; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_1) \rangle \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_2; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_1) \rangle \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_2; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_1) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle.\end{aligned}\quad (5.10)$$

Для удобства записи в формуле (5.10) указаны аргументы \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 волновой функции, но нужно помнить, что в действительности по ним производится интегрирование. Выполнив перестановку $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ переменных интегрирования во втором и третьем членах выражения (5.10), можно убедиться, что второй член совпадает с первым, а третий — с четвертым. Следовательно

но, выражение (5.10) принимает вид

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_{A,f}^{(-),S} | \varphi_{A,i}^{(+),S} \rangle = \\ & = \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle \pm \\ & \pm \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_2; E_f - \mathcal{E}_m) | \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle \langle \varphi_m^B(\mathbf{r}_1) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \rangle = \\ & = \langle \varphi_{A,f}^{(-)} | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle, \end{aligned} \quad (5.11)$$

откуда следует, что первый член формулы (5.9) совпадает с соответствующим членом формулы (5.3). При выводе последнего равенства использовано условие ортогональности рассеянного и связанного состояний при взаимодействии V :

$$\langle \varphi^{(-)} | \varphi_n^B \rangle = \langle \varphi_m^B | \varphi^{(+)} \rangle = 0. \quad (5.12)$$

Рассмотрим теперь второй член формулы (5.9). Ввиду тождественности электронов гамильтонианы H_0 и V_{12} (5.1) не изменяются при перестановке \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . Следовательно, оператор T (5.4) тоже симметричен:

$$T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = T(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (5.13)$$

Имея это в виду и переставляя радиус-векторы в формуле (5.10), получаем

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_{A,f}^{(-),S} | T | \varphi_{A,i}^{(+),S} \rangle = \\ & = \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) | T | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle \pm \\ & \pm \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_2; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_1) | T | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle = \\ & = \langle \varphi_{A,f}^{(-)} | T | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle \pm \langle \varphi_{B,f}^{(-)} | T | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle = \\ & = \langle \varphi_{A,f}^{(-)} | V_{12} | \Psi_{A,i}^{(+)} \rangle \pm \langle \varphi_{B,f}^{(-)} | V_{12} | \Psi_{A,i}^{(+)} \rangle. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Для вывода второй из форм (5.14) надо воспользоваться первой формулой (2.24). Следовательно, амплитуда рассеяния для симметризованных (или антисимметризованных) волновых функций дается суммой (или разностью) амплитуд рассеяния из канала A в A и из канала A в B . Первое из этих рассеяний называют *прямым*, а второе — *обменным рассеянием*. Из формул (5.11) и (5.14) ясно, что симметризованный

(или антисимметризованный) матричный элемент S -матрицы имеет вид

$$\langle \varphi_{A,f}^{(-)S} | S | \varphi_{A,i}^{(+)S} \rangle = \langle \varphi_{A,f}^{(-)} | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \times \\ \times [\langle \varphi_{A,f}^{(-)} | V_{12} | \Psi_{A,i}^{(+)} \rangle \pm \langle \varphi_{B,f}^{(-)} | V_{12} | \Psi_{A,i}^{(+)} \rangle]. \quad (5.15)$$

Для вычисления матричного элемента (5.15) необходимо определить волновую функцию $\Psi_{A,i}^{\pm}$, пользуясь уравнением Фаддеева (4.43), записанным в V -координатах. Но в первом борновском приближении по взаимодействию V_{12} уравнение Фаддеева не отличается от уравнения Липпмана—Швингера, в чем можно убедиться, сравнив формулы (4.43) и (4.44) в T -координатах. Поэтому запишем следующее приближенное выражение для матричного элемента (5.15):

$$\langle \varphi_{A,f}^{(-)S} | S | \varphi_{A,i}^{(+)S} \rangle \approx \langle \varphi_{A,f}^{(-)} | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \times \\ \times [\langle \varphi_{A,f}^{(-)} | V_{12} | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle \pm \langle \varphi_{B,f}^{(-)} | V_{12} | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle]. \quad (5.16)$$

Пользуясь формулой (5.5), вычислим первый член выражения (5.16):

$$\langle \varphi_{A,f}^{(-)} | \varphi_{A,i}^{(+)} \rangle = \\ = \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_m) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle = \\ = \delta_{m,n} \langle \varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1; E_f - \mathcal{E}_m) | \varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_m) \rangle = \\ = \delta_{m,n} \{ \delta_{f,i} - 2\pi i \delta(E_i - E_f) \times \\ \times \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_f) | \left(V + V \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}_i^2 / 2m - (K_1 + V) + i\epsilon} V \right) | \times \\ \times u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \rangle \}. \quad (5.17)$$

Здесь использовано условие ортонормированности связанных состояний в потенциале V

$$\langle \varphi_m^B | \varphi_n^B \rangle = \delta_{m,n}. \quad (5.18)$$

Появившаяся в формуле (5.17) волновая функция дается решением уравнения

$$K_1 u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}). \quad (5.19)$$

Это плоская волна

$$u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1). \quad (5.20)$$

Кроме того, в формуле (5.17)

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_i^2 + \mathcal{E}_n, \quad E_f = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}_f^2 + \mathcal{E}_m. \quad (5.21)$$

Аппроксимируем в формуле (5.16) волновую функцию $\varphi^{(\pm)}$ состояния рассеяния в потенциале V плоской волной $u^{(L)}$. Тогда, согласно формулам (5.16) и (5.17), получим

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_{A, f}^{(-), S} | S | \varphi_{A, i}^{(+), S} \rangle \approx \\ & \approx \delta_{m, n} \delta_{f, i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) [\delta_{m, n} \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_f) | V | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \rangle + \\ & \quad + \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_f) \varphi_m^B(\mathbf{r}_2) | V_{12} | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle \pm \\ & \quad \pm \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{k}_f) \varphi_m^B(\mathbf{r}_1) | V_{12} | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \varphi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle]. \quad (5.22) \end{aligned}$$

Здесь первый член в квадратных скобках соответствует рассеянию падающей частицы 1 на протоне 3 (фиг. 44). Состояние второго электрона, связанного в атоме, в этом члене остается неизменным. Множитель $\delta_{m, n}$ учитывает то обстоятельство, что этот член дает нулевой вклад в процессы неупругого рассеяния при $m \neq n$. Второй член соответствует рассеянию электрона 1 на связанном электроне 2. Наконец, третий член описывает процесс рассеяния, при котором связанный электрон 2 переставлен в межэлектронном взаимодействии V_{12} с электроном 1.

Применим теперь борновское приближение к S -матрице в T -координатах [формула (3.48)]. Запишем гамильтониан взаимодействия в каналах A и B :

$$\begin{aligned} V_A &= V_{31} + V_{12} = V(\mathbf{r}_1) + V_{12}(\mathbf{r}_{12}), \\ V_B &= V_{23} + V_{12} = V(\mathbf{r}_2) + V_{12}(\mathbf{r}_{12}). \end{aligned}$$

Здесь учтено, что при $m_3 = \infty$ координаты T_A и T_B совпадают с V -координатами (это ясно из фиг. 41). Симметризованное (или антисимметризованное) выраже-

ние (3.48) имеет в борновском приближении вид

$$\begin{aligned} \langle \phi_{A, f}^{(-), S} | S | \phi_{A, i}^{(+), S} \rangle \approx \delta_{m, n} \delta_{f, i} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \times \\ \times [\langle u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_f) \phi_m^B(\mathbf{r}_2) | (V(\mathbf{r}_1) + \\ + V_{12}(\mathbf{r}_{12})) | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \phi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle \pm \\ \pm \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{k}_f) \phi_m^B(\mathbf{r}_1) | (V(\mathbf{r}_2) + \\ + V_{12}(\mathbf{r}_{12})) | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \phi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle]. \quad (5.23) \end{aligned}$$

Сравнивая это выражение с формулой (5.22), замечаем, что во втором члене в квадратных скобках в выражении (5.23) имеется лишнее слагаемое

$$\begin{aligned} \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{k}_f) \phi_m^B(\mathbf{r}_1) | V(\mathbf{r}_2) | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \phi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle = \\ = \langle \phi_m^B(\mathbf{r}_1) | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \rangle \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{k}_f) | V(\mathbf{r}_2) | \phi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle \neq 0. \quad (5.24) \end{aligned}$$

Оно описывает процесс, при котором связанный электрон 2 меняется местами с падающим электроном 1 в потенциале V взаимодействия связанного электрона и протона. Но из физических соображений ясно, что в отсутствие межэлектронного взаимодействия V_{12} при $m_3 = \infty$ обмен электронами не должен происходить. Следовательно, член (5.24) в формуле (5.23) появился из-за ошибки. Причина ее — неправильное введение взаимодействия в выражение для S -матрицы в T -координатах. При строгом учете эффекта взаимодействия в формуле (5.16) нужно заменить плоскую волну $u^{(L)}$ в формуле (5.24) рассеянной волной $\phi^{(\pm)}$. Тогда в силу условия ортогональности

$$\langle \phi_m^B | \phi^{(+)} \rangle = 0$$

связанного и рассеянного состояний при взаимодействии V формула (5.24) примет вид

$$\begin{aligned} \langle \phi_m^B(\mathbf{r}_1) | \phi^{(+)}(\mathbf{r}_1; E_i - \mathcal{E}_n) \rangle \langle \phi^{(-)}(\mathbf{r}_2; E_f - \mathcal{E}_m) | \times \\ \times | V(\mathbf{r}_2) | \phi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle = 0. \quad (5.25) \end{aligned}$$

Таким образом, при правильном учете взаимодействия V выражение (5.24) обращается в нуль, а лишний

член в формуле (5.23) — нереальный призрак, возникающий вследствие неверного приближения. Итак, нужно иметь в виду, что необдуманное использование приближенных методов (вроде борновского приближения) в применении к S -матрице (3.48) в T -координатах связано с большим риском совершить ошибку.

Полагая в формуле (5.22)

$$T_{m, f; n, i}^{(L), D} \equiv \delta_{m, n} \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_f) | V(\mathbf{r}_1) | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \rangle + \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_f) \Phi_m^B(\mathbf{r}_2) | V_{12} | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \Phi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle, \quad (5.26)$$

$$T_{m, f; n, i}^{(L), E} \equiv \langle u^{(L)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{k}_f) \Phi_m^B(\mathbf{r}_1) | V_{12} | u^{(L)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}_i) \Phi_n^B(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (5.27)$$

и учитывая формулу (2.75) из гл. 4, получаем для вероятности перехода выражение

$$\omega_{m, f; n, i} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m} k_f^2 + \mathcal{E}_m - \frac{\hbar^2}{2m} k_i^2 - \mathcal{E}_n\right) \times \times |T_{m, f; n, i}^{(L), D} + T_{m, f; n, i}^{(L), E}|^2. \quad (5.28)$$

Заметим, что здесь, вообще говоря, $k_f \neq k_i$. Согласно формуле (2.80) из гл. 4, дифференциальное сечение рассеяния примет вид

$$\sigma(\theta) = \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{k_f}{k_i} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} |T_{m, f; n, i}^{(L), D} \pm T_{m, f; n, i}^{(L), E}|^2. \quad (5.29)$$

Здесь θ — угол рассеяния электрона. В формулах (5.26) и (5.27) нормировочные постоянные плоских волн определены формулой (5.20). Если заменить их величиной

$$u(\mathbf{r}_1; \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1), \quad (5.30)$$

то формула (5.29) приведет к виду

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= \frac{L^6}{(2\pi)^3} \frac{k_f}{k_i} \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} \left[\frac{(2\pi)^3}{L^3}\right]^2 |T_{m, f; n, i}^D \pm T_{m, f; n, i}^E|^2 = \\ &= \left[\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2}\right]^2 \frac{k_f}{k_i} |T_{m, f; n, i}^D \pm T_{m, f; n, i}^E|^2. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Входящие сюда величины $T_{m, f; n, i}^D$ и т. д. получаются из величин (5.26) заменой плоских волн $u^{(L)}$ плоскими волнами u (5.30).

Если учесть симметричность (антисимметричность) спиновых состояний электрона [так же, как в формуле (4.18) из гл. 4], то дифференциальное сечение рассеяния электронов на атомах водорода примет вид

$$\sigma(\theta) = \left[\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \right]^2 \frac{k_f}{k_i} \left\{ \frac{1}{4} |T_{m, f; n, i}^D + T_{m, f; n, i}^E|^2 + \right. \\ \left. + \frac{3}{4} |T_{m, f; n, i}^D - T_{m, f; n, i}^E|^2 \right\}. \quad (5.32)$$

Рассмотрим упругое рассеяние ($m = n$, $k_f = k_i$). Пусть до и после рассеяния атом водорода находится в основном состоянии

$$\varphi_0^B(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} \exp(-r/a_0), \quad (5.33)$$

где $a_0 = \hbar^2/me^2$ — борновский радиус. Полагая

$$\rho(r) = |\varphi_0^B(r)|^2, \quad \mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f,$$

придем, пользуясь формулой (5.26), к результату

$$f^D(\theta) \equiv - \frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} T_{f; i}^D = \\ = - \frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \left[\int \exp(-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_1) \left(-\frac{e^2}{r_1} \right) \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 + \right. \\ \left. + \int \exp(-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_1) \left(\frac{e^2}{r_{12}} \right) \exp(i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \right] = \\ = - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}_1 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_1) \left[-\frac{e^2}{r_1} + e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3\mathbf{r}_2 \right], \quad (5.34)$$

полностью совпадающему с результатом (4.11) из гл. 2 при $Z = 1$.

В гл. 2, § 4, п. «А» мы не учитывали член $T_{f, i}^E$, соответствующий обменному рассеянию. Он появляется, если в теории учесть квантовое движение электронов

внутри атома. Для амплитуды упругого обменного рассеяния получаем с учетом формулы (5.27)

$$T_{f,i}^E = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_2) \varphi_0^B(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \times \\ \times \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1) \varphi_0^B(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2. \quad (5.35)$$

Взять этот интеграл — сложное дело. Мы наметим лишь схему его вычисления. На основании тождества

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3\boldsymbol{\kappa} \frac{\exp\{i\boldsymbol{\kappa} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\}}{\boldsymbol{\kappa}^2} \quad (5.36)$$

приведем формулу (5.35) к виду

$$T_{f,i}^E = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{2\pi^2} \int d^3\boldsymbol{\kappa} \frac{1}{\boldsymbol{\kappa}^2} \int d^3\mathbf{r}_2 \times \\ \times \exp\{-i(\mathbf{k}_f + \boldsymbol{\kappa}) \cdot \mathbf{r}_2\} \varphi_0^B(\mathbf{r}_2) \int d^3\mathbf{r}_1 \times \\ \times \exp\{i(\mathbf{k}_i + \boldsymbol{\kappa}) \cdot \mathbf{r}_1\} \varphi_0^B(\mathbf{r}_1).$$

Учитывая выражение $\varphi_0^B(r)$ (5.33), получаем

$$\int d^3\mathbf{r} \exp\{-i(\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}) \cdot \mathbf{r}\} \varphi_0^B(\mathbf{r}) = 8 \sqrt{\pi} a_0^{3/2} \frac{1}{[1 + a_0^2 |\mathbf{k}_f + \boldsymbol{\kappa}|^2]^2}.$$

Поэтому

$$T_{f,i}^E = \frac{4e^2 a_0^3}{\pi^4} \int d^3\boldsymbol{\kappa} \frac{1}{\boldsymbol{\kappa}^2 [1 + a_0^2 |\mathbf{k}_f + \boldsymbol{\kappa}|^2]^2 [1 + a_0^2 |\mathbf{k}_i + \boldsymbol{\kappa}|^2]^2}. \quad (5.37)$$

Последний интеграл можно взять методом параметрического интегрирования Фейнмана, применяемым в квантовой теории поля. Вычисление это довольно громоздкое и здесь не проводится. Отсылаем читателей, интересующихся методом интегрирования Фейнмана, к руководствам по квантовой теории поля. Амплитуда обменного рассеяния составляет около 10% прямого рассеяния. Если, кроме того, учесть неточность борновского приближения самого по себе, то с физической точки зрения нет смысла слишком точно вычислять интеграл (5.37),

Приложение

А. Полиномы Лежандра и шаровые гармонические функции

Полиномы Лежандра $P_l(x)$ определяются в интервале $-1 \leq x \leq 1$:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.1})$$

Выпишем несколько первых полиномов Лежандра при малых l :

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1; & P_1(x) &= x; \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1); & P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^2 - 3x); \dots \end{aligned}$$

При произвольном l :

$$P_l(1) = 1, \quad P_l(-1) = (-1)^l.$$

Полиномы Лежандра удовлетворяют дифференциальному уравнению

$$\frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} \right] + l(l + 1) P_l(x) = 0 \quad (\text{A.2})$$

[показывается прямой подстановкой формулы (A.1) в уравнение (A.2)]. Умножая уравнение (A.2) на (A.1) и интегрируя по частям, получаем

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 P_{l'}(x) \left[\frac{d}{dx} \left((1 - x^2) \frac{dP_l(x)}{dx} \right) + l(l + 1) P_l(x) \right] dx &= \\ &= \int_{-1}^1 \left[(x^2 - 1) \frac{dP_{l'}}{dx} \frac{dP_l}{dx} + l(l + 1) P_{l'} P_l \right] dx = 0. \end{aligned}$$

Вычитая из последнего выражения выражение, получающееся из него заменой $l \rightarrow l'$, получаем

$$[l(l + 1) - l'(l' + 1)] \int_{-1}^1 P_{l'}(x) P_l(x) dx = 0.$$

Следовательно, при $l' \neq l$ полиномы Лежандра ортогональны:

$$\int_{-1}^1 P_{l'}(x) P_l(x) dx = 0. \quad (\text{A.3})$$

Используя определение (A.1) и производя последовательное интегрирование по частям, можно доказать соотношение

$$\int_{-1}^1 P_l^2(x) dx = \frac{2}{2l+1}. \quad (\text{A.4})$$

Объединяя результаты (A.3) и (A.4), получаем

$$\int_{-1}^1 P_{l'}(x) P_l(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{l', l}. \quad (\text{A.5})$$

Присоединенные функции Лежандра $P_l^m(x)$ определяются соотношением

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_l(x)}{dx^m}, \quad m=0, 1, 2, \dots, l. \quad (\text{A.6})$$

При малых l и m они имеют вид

$$P_1^1(x) = (1-x^2)^{1/2};$$

$$P_2^1(x) = 3(1-x^2)^{1/2} x; \quad P_2^2(x) = 3(1-x^2);$$

$$P_3^1(x) = \frac{3}{2}(1-x^2)^{1/2} (5x^2-1);$$

$$P_3^2(x) = 15(1-x^2)x;$$

$$P_3^3(x) = 15(1-x^2)^{3/2}$$

и т. д.

Эти функции — решения уравнения

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP_l^m(x)}{dx} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^m(x) = 0. \quad (\text{A.7})$$

Пользуясь формулами (A.6) и (A.7), можно доказать, что

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_l^m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{l', l}. \quad (\text{A.8})$$

Шаровые гармонические функции определяются формулой

$$Y_{l, m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi). \quad (\text{A.9})$$

Операторы

$$L^2 \equiv \hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right],$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{A.10})$$

— это операторы: первый орбитального момента количества движения, а второй — его z -составляющей. Легко убедиться, что, действуя на функции (A.9), эти операторы дают

$$L^2 Y_{l, m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l, m}(\theta, \varphi), \quad l=0, 1, 2, \dots,$$

$$L_z Y_{l, m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{l, m}(\theta, \varphi), \quad m=-l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (\text{A.11})$$

Из формулы (A.9) следует, что

$$Y_{l, -m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{l, m}^*(\theta, \varphi). \quad (\text{A.12})$$

При малых l, m функции $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ имеют вид

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}};$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(i\varphi);$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1);$$

$$Y_{2,1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \exp(i\varphi);$$

$$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(2i\varphi),$$

Они удовлетворяют соотношениям ортонормированности

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta Y_{l', m'}^*(\theta, \varphi) Y_{l, m}(\theta, \varphi) = \delta_{l', l} \delta_{m', m}. \quad (\text{A.13})$$

Б. Шаровые функции Бесселя

Уравнение Гельмгольца

$$[\Delta + k^2] \psi(\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{Б.1})$$

в сферических координатах принимает вид

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + k^2 \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0. \quad (\text{Б.2})$$

Если нет зависимости от φ , то решение уравнения (Б.2) можно разложить в ряд по ортогональной системе функций $P_l(\cos \theta)$:

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (\text{Б.3})$$

Подставляя это разложение в уравнение (Б.2), приходим к дифференциальному уравнению для функций $R_l(r)$:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0.$$

Положив здесь $x = kr$, приведем дифференциальное уравнение к виду

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} + 1 - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] R_l(x) = 0. \quad (\text{Б.4})$$

Введем новую неизвестную функцию

$$R_l(x) = \frac{1}{\sqrt{x}} f_l(x). \quad (\text{Б.5})$$

Получаем, что она удовлетворяет уравнению Бесселя

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \left(1 - \frac{(l+1/2)^2}{x^2} \right) \right] f_l(x) = 0. \quad (\text{Б.6})$$

Два независимых решения этого уравнения даются функцией Бесселя $J_{l+1/2}(x)$ и функцией Неймана $N_{l+1/2}(x)$. Функции Неймана определяются через функции Бесселя:

$$N_n(x) = \frac{J_n(x) \cos n\pi - J_{-n}(x)}{\sin n\pi}, \quad (\text{Б.7})$$

а сами функции Бесселя определены степенным рядом

$$J_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!(n+m)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{n+2m}. \quad (\text{Б.8})$$

С учетом преобразования (Б.5), определим шаровые функции Бесселя и Неймана соотношениями

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x), \quad n_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{l+1/2}(x). \quad (\text{Б.9})$$

Поскольку это — два независимых решения уравнения (Б.4), общее решение уравнения (Б.2) в случае, когда отсутствует зависимость от φ , дается формулой

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)] P_l(\cos \theta). \quad (\text{Б.10})$$

Входящие сюда константы A_L и B_L определяются граничными условиями, которыми нужно дополнить дифференциальное уравнение (Б.2). Далее, определим шаровые функции Ханкеля 1-го и 2-го рода:

$$h_l^{(1)}(x) = j_l(x) + i n_l(x), \quad h_l^{(2)}(x) = j_l(x) - i n_l(x). \quad (\text{Б.11})$$

Из сравнения формул (Б.9) и (Б.8) ясно, что при малых l они выражаются через элементарные функции:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x},$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2},$$

$$n_0(x) = -\frac{\cos x}{x},$$

$$n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x},$$

$$n_2(x) = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3 \sin x}{x^2}.$$

В общем виде

$$\begin{aligned} j_l(x) &= (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\sin x}{x} \right), \\ n_l(x) &= -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\cos x}{x} \right). \end{aligned} \quad (\text{Б.12})$$

Пользуясь рядом (Б.8) для функции Бесселя, можно видеть, что вблизи начала координат

$$\begin{aligned} j_l(x) &\xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{x^l}{(2l+1)!!} \left(1 - \frac{x^2}{2(2l+3)} + \dots \right), \\ n_l(x) &\xrightarrow{x \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}. \end{aligned} \quad (\text{Б.13})$$

Таким образом, функция $n_l(x)$ в начале координат расходится. В формулах (Б.13) по определению

$$(2l+1)!! = (2l+1)(2l-1)(2l-3) \dots 5 \cdot 3 \cdot 1,$$

$$(2l-1)!! = (2l-1)(2l-3)(2l-5) \dots 5 \cdot 3 \cdot 1.$$

В то же время при больших x :

$$\begin{aligned} j_l(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{L\pi}{2} \right), \\ n_l(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} -\frac{1}{x} \cos \left(x - \frac{L\pi}{2} \right), \\ h^{(1)}(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} (-i)^{l+1} \frac{\exp(ix)}{x}, \\ h^{(2)}(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} (i)^{l+1} \frac{\exp(-ix)}{x}. \end{aligned} \quad (\text{Б.14})$$

Далее, докажем формулу Рэлея

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta). \quad (\text{Б.15})$$

Левая часть — плоская волна, распространяющаяся в направлении оси z , следовательно, — это решение уравнения Гельмгольца (Б.1). Оно ограничено при $r = 0$. Поэтому в общем решении (Б.10) нужно принять $B_l = 0$:

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos \theta). \quad (\text{Б.16})$$

Коэффициенты A_l определим, сравнивая обе части равенства. Так как соотношение (Б.16) справедливо при любых r , можно рассмотреть случай малых r . Разлагая левую часть в ряд по степеням $kr \cos \theta$ и применяя в правой части формулу (Б.13), получаем

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(ikr \cos \theta)^l}{l!} \sim \sum_{l=0}^{\infty} A_l \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} P_l(\cos \theta).$$

Согласно определению (А.1), коэффициент при старшей степени $(\cos \theta)^l$ в $P_l(\cos \theta)$ таков:

$$(2l)!/2^l (l!)^2.$$

Поэтому должно выполняться равенство

$$\frac{(ikr \cos \theta)^l}{l!} = A_l \frac{(2l)!}{2^l (l!)^2} \frac{(kr \cos \theta)^l}{(2l+1)!!},$$

откуда

$$A_l = i^l (2l+1).$$

Подставляя найденное значение в формулу (Б.16), приходим к искомой формуле Рэлея (Б.15).

Наконец, докажем справедливость разложения в ряд по парциальным волнам для функции Грина, даваемой формулой (3.3) из гл. 3:

$$\frac{\exp(ikR)}{R} = ik \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(kr_<) h_l^{(1)}(kr_>) P_l(\cos \chi), \quad (\text{Б.17})$$

$$\frac{\exp(ikR)}{R} \equiv$$

$$\left\{ ik \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(kr') h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \chi), \quad r > r'; \quad (\text{Б.18}) \right.$$

$$\left. ik \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(kr) h_l^{(1)}(kr') P_l(\cos \chi), \quad r' > r. \quad (\text{Б.19}) \right.$$

Здесь $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, а χ — угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}' . При $R \neq 0$ левая часть равенства (Б.17) удовлетворяет уравнению Гельмгольца (Б.1). Сначала рассмотрим случай $r > r'$. Тогда в левой части при $r \rightarrow \infty$

мы имеем расходящуюся сферическую волну. Следовательно, левую часть равенства (Б.17) можно разложить в ряд по степеням функций Ханкеля первого рода $h^{(1)}(kr)$ [(формула (Б.11)]:

$$\frac{\exp(ikR)}{R} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l(kr') h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \chi). \quad (\text{Б.20})$$

Но при фиксированном r и переменном r' левая часть равенства (Б.17) тоже есть решение уравнения Гельмгольца. И так как $r \neq 0$, в начале координат по r' нет особенности. Следовательно, можно написать

$$\frac{\exp(ikR)}{R} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l(kr) j_l(kr') P_l(\cos \chi). \quad (\text{Б.21})$$

Разложения (Б.20) и (Б.21) допустимы одновременно, откуда вытекает, что искомое разложение должно иметь вид

$$\frac{\exp(ikR)}{R} = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr') h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \chi). \quad (\text{Б.22})$$

Для определения постоянных коэффициентов C_l сравним обе стороны равенства (Б.22) при $r \rightarrow \infty$. В левой части равенства (Б.22) при этом $R \rightarrow r - r' \cos \chi$, а в правой части можно использовать асимптотические формулы (Б.14). Тогда формула (Б.22) при $r \rightarrow \infty$ примет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \exp\{ik(r - r' \cos \chi)\} = \\ = \sum_{l=0}^{\infty} C_l j_l(kr') (-i)^{l+1} \frac{\exp(ikr)}{kr} P_l(\cos \chi), \end{aligned}$$

т. е.

$$\exp(-ikr' \cos \chi) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l \frac{(-i)^{l+1}}{k} j_l(kr') P_l(\cos \chi). \quad (\text{Б.23})$$

Положив в формуле Рэля (Б.15) $\theta = \pi - \chi$, на основании соотношения

$$P_l(-\cos \chi) = (-1)^l P_l(\cos \chi)$$

приведем ее к виду

$$\exp(-ikr' \cos \chi) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (-i)^l j_l(kr') P_l(\cos \chi). \quad (\text{Б.24})$$

Сравнивая формулы (Б.23) и (Б.24), находим

$$C_l = ik(2l+1).$$

Подставив этот результат в формулу (Б.22), приходим к выражению (Б.18). Мы рассмотрели случай, когда $r > r'$. Путем аналогичных рассуждений, можно доказать формулу (Б.19) и в случае, когда $r < r'$. Объединив оба случая, получим формулу (Б.17).

Литература

ИЗБРАННЫЕ МОНОГРАФИИ ПО ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

1. *Wu T. Y., Ohmura T.*, Quantum Theory of Scattering, Prentice-Hall, 1962. (Имеется перевод: *Ву Т. Ю., Омюра Т.* Квантовая теория рассеяния. — М.: Наука, 1969.)
 2. *Goldberger M. L., Watson K. M.*, Collision Theory, John Wiley & Sons, 1964. (Имеется перевод: *Гольдбергер М., Ватсон К.* Теория столкновений. — М.: Мир, 1967.)
 3. *Mott N. F., Massey H. G. W.*, The Theory of Atomic Collisions, 3rd ed., Oxford, 1965. (Имеется перевод: *Мотт Н., Мессу Г.* Теория атомных столкновений. — М.: Мир, 1969.)
 4. *Newton R. G.*, Scattering Theory of Waves and Particles McGraw-Hill, 1966. (Имеется перевод: *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. — М.: Мир, 1969.)
 5. *Joachain C. J.*, Quantum Collision Theory North-Holland, 1975. На японском языке есть только одна книга:
 6. *Томонага С., Тани Д., Миядзима Т., Кай Ц., Миядзава Х.* Математические методы квантовой механики, Иванами. (Современная прикладная математика.)
- Упрощенное изложение теории рассеяния дается во многих учебниках по квантовой механике.
- Статей по приложениям теории рассеяния необозримо много (несколько тысяч или несколько десятков тысяч), и все их перечислить здесь невозможно. Из типичных классических статей укажем три:
7. *Møller C.*, Danske Videnskab. Selskab. Mat-fys. Medd., 23 (1945).
 8. *Lippmann B. A., Schwinger J.*, Phys. Rev., 79, 469 (1950).
 9. *Gell-Mann M., Goldberger M. L.*, Phys. Rev., 91, 368 (1953).
- Далее, в книге
10. *Blatt J. M., Weisskopf V. F.*, Theoretical Nuclear Physics, John Wiley & Sons, 1952 (имеется перевод: *Блатт Дж., Вайскопф В.* Теоретическая ядерная физика. — М.: ИЛ, 1954) подробно даны приложения теории рассеяния к ядерной физике. Предельные операции в гл. 4 изложены по статье
 11. *Sunakawa S.*, Progr. Theor. Phys., 14, 175 (1955).
- Метод описания системы трех тел с помощью V -координат в гл. 5 изложен по статьям
12. *Sunakawa S.*, Progr. Theor. Phys., 24, 963 (1960).
 13. *Hirooka M., Sunakawa S.*, Progr. Theor. Phys., 52, 131 (1974).
 14. *Matsuda K., Hirooka M., Sunakawa S.*, Progr. Theor. Phys., 5, 79 (1975).

Методу Фаддеева посвящены статьи

15. Фаддеев Л. Д. — ЖЭТФ, 1961, т. 41, в. 6 (12), с. 1850.

16. Weinberg S., Phys. Rev., B133, 232 (1964).

Обзор на японском языке по проблеме рассеяния в системе трех тел содержится в статьях

17. Сасакава Т., «Нихон буцуригаку дзасси», 23, 736 (1968); 26, 658 (1971).

Дополнение редактора перевода

1. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, 1966.
2. Мигдал А. Б., Крайнов В. П. Приближенные методы квантовой механики. — М.: Наука, 1966.

Предметный указатель

Адиабатическая теорема 130
Амплитуда рассеяния 32
Атомный формфактор 52

Волновые пакеты 125
— групповая скорость 132
Выключение взаимодействия
адиабатическое 125
— — квазистатическое 125

Граничное условие задачи рас-
сеяния 32

Длина рассеяния 97
Динамический структурный
фактор 177

Корреляционная функция 178

Матрица рассеяния 123
Метод ослабления 15

Обращение времени 150
Оператор волновой Мёллера
130
— хронологический Дайсона
121
Оптическая теорема 47, 62, 148
— — обобщенная 88
Оптическая модель 180
Оптический потенциал 180

Параметр удара 16
Парциальные волны 71
— — анализ 70
Полиномы Лежандра 73, 254
Представление взаимодействия
113
— Гейзенберга 107
— Шредингера 107
Приближение оптическое 181
— первое борновское 48
— эйконала 59
Приведенная масса 28
Принцип детального равнове-
сия 150, 159, 161

Рассеяние дифракционное 90
— многократное 14, 171
— многочастичной системой 168
— на абсолютно черном шаре
64
— на потенциальной яме в
квантовой механике 93
— — — в классической ме-
ханике 17
— на твердом шаре 84
— нейтронов в веществе 175
— обменное 247
— потенциальное 86
— прямое 247
— резерфордское 19
— резонансное 76, 86, 182
— — S-волна 101
— с перегруппировкой частиц
162
— тождественных частиц 162
— электронов
— — на атомах 50
— — на атоме водорода 243

- Резонанс при нулевой энергии 97, 99, 102
- Сечение рассеяния дифференциальное 13
 — — полное 13
 — реакций 86
- Система отсчета лабораторная 21
 — центра масс 21
- Соотношение взаимности 159
- Состояние асимптотическое 201
 — метастабильное 100
 — рассеяния 137
 — связанное 99
- Угол рассеяния 13
- Уравнение Гельмгольца 31
 — движения гейзенберговское 109
 — Липпмана — Швингера 40, 129, 192, 194, 195, 231
 — Фаддеева 238
 — — для волновой функции 241
- Фазовый сдвиг 74, 79
- Фазы рассеяния 74
 — знаки 81
- Фейнмановские диаграммы 54
- Формальное решение задачи рассеяния 42
- Формула Брейта — Вигнера с одним уровнем 105
 — Ван-Хова 177
 — Релея 71
- Функция Грина 33
- Шаровые функции 67
 — — Бесселя 70, 258
 — — Неймана 70, 258
- Ширина резонанса 103
- Эффект Рамзауэра — Таунсенда 96
- Ядерные реакции 86

Оглавление

Предисловие редактора перевода	5
Введение	7
Глава 1. Рассеяние и наблюдаемые величины	11
§ 1. Сечение рассеяния	11
§ 2. Теория рассеяния в классической механике	15
§ 3. Лабораторная система и система центра масс	21
Глава 2. Стационарная теория рассеяния	26
§ 1. Выделение движения центра масса в системе двух частиц	26
§ 2. Интегральное уравнение рассеяния	29
§ 3. Амплитуда рассеяния и дифференциальное сечение	42
§ 4. Борновское приближение	48
§ 5. Квазиклассическое приближение	56
Глава 3. Разложение по парциальным волнам	65
§ 1. Уравнение Шредингера в сферических координатах	65
§ 2. Разложение асимптотики волновой функции по парциальным волнам	70
§ 3. Разложение интегрального уравнения рассеяния в ряд по парциальным волнам	75
§ 4. Определение фаз рассеяния из условия непрерывности волновой функции	82
§ 5. Сечение реакций	86
§ 6. Приближенные методы, основанные на разложении по парциальным волнам	90
Глава 4. Нестационарная теория рассеяния	106
§ 1. Представление Гейзенберга и представление взаимодействия	106
§ 2. Теория S -матрицы	122
§ 3. Принцип детального равновесия и обращение времени	149
§ 4. Взаимное рассеяние тождественных частиц	162
§ 5. Рассеяние на многочастичных мишенях	168
§ 6. Резонансное рассеяние	182

Глава 5. Теория рассеяния в системе трех тел	188
§ 1. Проблемы теории рассеяния с перегруппировкой частиц	188
§ 2. V -координаты	196
§ 3. Переход к T -координатам	219
§ 4. Метод Фаддеева	231
§ 5. Рассеяние электронов на атоме водорода	243
Приложение	254
Литература	262
Предметный указатель	265

УВАЖАЕМЫЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Ваши замечания о содержании книги, ее оформлении, качестве перевода и другие просим посылать по адресу: 129820, Москва, И-110, ГСП, 1-й Рижский пер., 2, изд-во «Мир».

С. Сунакава

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЙНИЯ

Ст. научный редактор **Е. Куранский**
Мл. научные редакторы **Г. Сорокина, Р. Зацепина**
Художник **Ю. Урманчев**
Художественный редактор **Л. Безрученков**
Технический редактор **Г. Алюлина**
Корректор **С. Денисова**

ИБ № 1624

Сдано в набор 24.08.78. Подписано к печати 19.12.78. Формат 84×108^{1/32}. Бумага типографская № 2. Латинская гарнитура. Высокая печать. Объем 4,25 бум. л. Усл. печ. л. 14,28. Уч.-изд. л. 12,61. Изд. № 2/9859. Тираж 5000 экз. Заказ № 1271. Цена 1 р. 60 к.

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»
129820, Москва, И-110, ГСП, 1-й Рижский пер., 2

Ордена Трудового Красного Знамени Ленинградская типография № 2 имени Евгении Соколовой «Союзполиграфпрома» при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли. 198052, Ленинград, Л-52, Измайловский проспект, 29

К сведению читателей

**В МОСКОВСКОМ ДОМЕ КНИГИ
ОТКРЫТА ФИРМЕННАЯ СЕКЦИЯ
ПО ПРОДАЖЕ КНИГ ИЗДАТЕЛЬСТВА «МИР»**

Здесь представлены книги по естественным наукам и новой технике, выпущенные издательством «Мир».

Секция принимает заказы на готовящиеся к выпуску научно-технические книги, а также высылает наложенным платежом вышедшие ранее и имеющиеся в продаже книги.

Адрес для заказов: 121019, Москва, Г-19, Проспект Калинина, дом 26, п/я № 42. Московский Дом книги

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»