

**ОДЕССКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ**

**ТАРАСОВ В. А.**

**ЛЕКЦИИ ПО ТЕОРИИ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ**

**ОДЕССА – 2002 г.**

## Тема: Оператор эволюции и S-матрица (матрица рассеяния).

### Лекция № 1

#### §1. Оператор эволюции и S-матрица.

Основной задачей квантовой теории ядерных реакций является изучение процессов взаимодействия частиц. Условимся под частицей понимать физическую систему, локализованную в пространстве под действием внутренних сил.

При столкновении двух частиц вследствие взаимодействия между ними возможно как упругое рассеяние, так и неупругие процессы (неупругое рассеяние и различные реакции). Рассеяние называется упругим, если при столкновении внутренние состояния сталкивающихся частиц остаются неизменными. При неупругом рассеянии взаимодействие сопровождается изменением внутреннего состояния одной или обеих сталкивающихся частиц. В случае реакции взаимодействие сопровождается перераспределением частиц, то есть в результате взаимодействия образуются частицы, по природе отличные от сталкивающихся частиц.

Процесс столкновения частиц условно можно разделить на три этапа. Начальный этап, когда сталкивающиеся частицы достаточно удалены друг от друга, так что взаимодействием между ними можно пренебречь. Второй этап, когда в результате сближения частиц между ними проявляется взаимодействие, приводящее в конечном итоге к какому-либо процессу. И наконец, заключительный этап, когда частицы, образовавшиеся в результате процесса взаимодействия, удаляются друг от друга на расстояния, на которых можно пренебречь взаимодействием между ними.

Для описания процессов рассеяния и реакций удобно ввести оператор рассеяния  $\mathcal{S}$ , матричные элементы которого образуют матрицу рассеяния  $S_{ij} = \langle i | \mathcal{S} | j \rangle$ , где  $|i\rangle$  - орты базиса Гильбертового пространства. Пусть  $\psi(\vec{r}, t = -\infty)$  - начальная волновая функция системы, описывающая относительное движение частиц системы и их внутреннее состояние в момент времени  $t = -\infty$ , и  $\psi(\vec{r}, t = \infty)$  - конечная волновая функция, описывающая рассматриваемую систему частиц после столкновения в момент времени  $t = \infty$ . Оператор рассеяния связывает начальное состояние квантовой физической системы  $\psi(\vec{r}, t = -\infty)$ , соответствующее сталкивающимся частицам, находящимся на достаточно большом расстоянии друг от друга (расстояние, на котором взаимодействием

между частицами можно пренебречь), с конечными состояниями  $\psi(\vec{r}, t = \infty)$ , соответствующими разлету образующихся частиц на большие расстояния (расстояния, на которых взаимодействием между частицами можно пренебречь). Поэтому оператор рассеяния и матрицу рассеяния можно определить следующими соотношениями:

$$\psi(\vec{r}, t = \infty) = \mathcal{S} \psi(\vec{r}, t = -\infty), \quad (1.1)$$

$$|\psi(\vec{r}, t = \infty)\rangle = S |\psi(\vec{r}, t = -\infty)\rangle \quad (1.2)$$

или 
$$\psi_i(\vec{r}, t = \infty) = \sum_j S_{ij} \psi_j(\vec{r}, t = -\infty).$$

Оператор рассеяния впервые был введен Гейзенбергом.

Предварительно мы рассмотрим некоторые вопросы, связанные с дальнейшим развитием и обобщением математического аппарата квантовой механики. Имеется в виду рассмотрение способов описания развития процесса во времени.

До сих пор для описания развития физического процесса во времени мы всецело основывались на общем (или временном) уравнении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H \Psi(\vec{r}, t), \quad (1.3)$$

согласно которому волновая функция системы  $\Psi(\vec{r}, t)$  может быть найдена в произвольный момент времени  $t$ , если известно ее начальное значение  $\Psi(\vec{r}, t = 0)$ . При таком подходе развитию процесса во времени отвечает соответствующее изменение волновой функции системы  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Этот способ описания развития физического процесса во времени связан с заданием явного вида потенциала взаимодействия во всем пространстве. Однако в ряде важных случаев потенциал взаимодействия (не зависящий от скорости движения) не существует. Поэтому в современной квантовой теории важную роль играет более общая постановка задачи описания развития физического процесса во времени. Развитие процесса во времени можно описать с помощью оператора временной эволюции (или оператора временного сдвига)  $\hat{V}(t, t_0)$ , действующего на волновую функцию системы, заданную в некоторый произвольный начальный момент времени

$$\Psi(\vec{r}, t) = \hat{V}(t, t_0) \Psi(\vec{r}, t_0). \quad (1.4)$$

Например, если за начало отсчета времени приняли момент  $t = 0$ , то

$$\Psi(\vec{r}, t) = \hat{V}(t, 0) \Psi(\vec{r}, 0). \quad (1.5)$$

Согласно вышеизложенному применительно к задаче рассеяния частиц обобщенная задача теории заключается в нахождении волновой функции системы по прошествии большого

времени после процесса взаимодействия частиц. Именно, пусть задана волновая функция системы частиц  $\psi_a(\vec{r}, t = -\infty)$  в начальном состоянии до взаимодействия, где индексом  $a$  мы обозначили совокупность квантовых чисел (полный набор), определяющих состояние системы до рассеяния. Волновая функция системы по прошествии большого времени после процесса взаимодействия частиц  $\psi_b(\vec{r}, t = \infty)$  может быть выражена с помощью оператора эволюции, описывающего эволюцию волновой функции во времени, следующим образом:

$$\Psi_b(\vec{r}, t = \infty) = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow \infty}} \bar{V}(t, t_0) \Psi_a(\vec{r}, t_0 = -\infty) \quad (1.6)$$

Таким образом, для оператора рассеяния  $\mathcal{S}$  (см. (1.1)) получаем выражение:

$$\mathcal{S} = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow \infty}} \bar{V}(t, t_0) \quad (1.7)$$

Предполагается, что как в начальном, так и в конечном состоянии частицы разведены на достаточно большие расстояния друг от друга, так что можно не учитывать взаимодействие между ними (так называемая адиабатическая гипотеза).

Из условия сохранения вероятности следует унитарность оператора рассеяния

$$\mathcal{S}^\dagger \mathcal{S} = 1 \quad , \text{ то есть } \mathcal{S}^\dagger = \mathcal{S}^{-1} \quad (1.8)$$

Очевидно, конечная волновая функция системы может совпадать с начальной волновой функцией только в том случае, если состояние системы не изменяется. Поэтому все возможные переходы в системе, то есть все возможные процессы рассеяния и реакций будут связаны с различием между конечной и начальной волновыми функциями системы и будут описываться разностью указанных функций:

$$\Psi' = \psi(\vec{r}, t = \infty) - \psi(\vec{r}, t = -\infty) = \mathcal{K}\psi(\vec{r}, t = -\infty), \quad (1.9)$$

где

$$\mathcal{T} = \mathcal{S} - \mathcal{E}, \quad \mathcal{E} - \text{ едичный оператор. } \quad (1.10)$$

Оператор  $\mathcal{T}$  - оператор перехода.

В общем случае произвольной реакции полный гамильтониан системы  $H$  удобно разбить на две части двумя способами:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + U = \mathcal{H}'_0 + U', \quad (1.11)$$

где  $\mathcal{H}_0$  и  $\mathcal{H}'_0$  - операторы, описывающие кинетическую энергию относительного движения и внутреннее движение соответственно сталкивающихся и разлетающихся частиц;  $U$  и  $U'$  - потенциалы

взаимодействия соответственно сталкивающихся и разлетающихся частиц.

Очевидно, что в случае рассеяния (как упругого, так и неупругого)  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}'_0$  и  $\hat{U} = \hat{U}'$ .

Введем собственные функции операторов  $\mathcal{H}_0$  и  $\mathcal{H}'_0$ :

$$H_0|\varphi_\alpha\rangle = E_\alpha|\varphi_\alpha\rangle \text{ и } H'_0|\varphi_\beta\rangle = E_\beta|\varphi_\beta\rangle, \quad (1.12)$$

где  $E_\alpha$  и  $E_\beta$  - собственные значения операторов  $\mathcal{H}_0$  и  $\mathcal{H}'_0$ . Наборы собственных функций  $\varphi_\alpha$  и  $\varphi_\beta$  - полные ортонормированные, удовлетворяющие условиям:

$$\langle\varphi_\alpha|\varphi_\alpha\rangle = \delta_{\alpha\alpha} \text{ и } \langle\varphi_\beta|\varphi_\beta\rangle = \delta_{\beta\beta} \text{ и} \quad (1.13)$$

которые могут быть выбраны за базис. Выберем в качестве базиса набор  $\varphi_\alpha$  и будем в дальнейшем для него пользоваться таким обозначением  $|\alpha\rangle$ .

Отметим, что в случае реакций, когда природа сталкивающихся частиц изменяется, системы собственных функций  $\varphi_\alpha$  и  $\varphi_\beta$  различны. В случае рассеяния системы собственных функций  $\varphi_\alpha$  и  $\varphi_\beta$  совпадают.

Вследствие ограниченности радиуса действия сил взаимодействия между частицами, потенциалами  $\hat{U}$  и  $\hat{U}'$  можно пренебрегать соответственно в начальном и конечном состояниях.

Разложим волновые функции начального  $\Psi_a(\vec{r}, t = -\infty)$  и конечного  $\Psi_b(\vec{r}, t = \infty)$  состояний по базису  $|\alpha\rangle$ :

$$|\Psi(-\infty)\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha}|\alpha\rangle \text{ и } |\Psi(\infty)\rangle = \sum_{\alpha} \tilde{c}_{\alpha}|\alpha\rangle, \quad (1.14)$$

где  $c_{\alpha} = \langle\alpha|\Psi(-\infty)\rangle$  и  $\tilde{c}_{\alpha} = \langle\alpha|\Psi(\infty)\rangle$ .

Подставляем выражения (1.14) в (1.2) и получим

$$\sum_{\beta} \tilde{c}_{\beta}|\beta\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha}\mathcal{S}|\alpha\rangle. \quad (1.15)$$

Умножим выражение (1.15) на сопряженный базисный вектор  $\langle\beta|$  и учитывая ортонормированность базиса (1.13), получим

$$\tilde{c}_{\beta} = \sum_{\alpha} \langle\beta|\mathcal{S}|\alpha\rangle c_{\alpha} = \sum_{\alpha} S_{\beta\alpha} c_{\alpha}, \quad (1.16)$$

где матрица оператора рассеяния в базисе  $|\alpha\rangle$ :

$$S_{\beta\alpha} = \langle\beta|\mathcal{S}|\alpha\rangle \quad (1.17)$$

или используя традиционное обозначение скалярного произведения

$$S_{\beta\alpha} = (\varphi_{\beta}, \mathcal{S}\varphi_{\alpha}).$$

Если система в начальный момент времени  $t = -\infty$  находилась в определенном состоянии, совпадающем с каким-либо базовым

вектором, например,  $\varphi_{\alpha_0} = |\alpha_0\rangle$ , то коэффициент разложения из (1.14) равен  $c_\alpha = \delta_{\alpha\alpha_0}$  и

$$\tilde{c}_\beta = S_{\beta\alpha_0}.$$

Как известно, квадраты модуля коэффициентов разложения волновой функции по базису характеризуют вероятность обнаружить систему в состоянии, описываемом соответствующей волновой функцией базиса. Таким образом, вероятность обнаружения системы после взаимодействия в состоянии  $|\beta\rangle$ , если первоначально (до взаимодействия) система находилась в состоянии  $|\alpha\rangle$ , равна:

$$|\tilde{c}_\beta|^2 = |S_{\beta\alpha}|^2. \quad (1.18)$$

Из условия нормировки волновой функции, а также из условия унитарности оператора рассеяния (1.8) следует:

$$\sum_{\beta} |S_{\beta\alpha}|^2 = 1. \quad (1.19)$$

Согласно (1.9), вероятность перехода системы из состояния  $|\alpha\rangle$  в состояние  $|\beta\rangle$  может также характеризоваться элементом матрицы оператора перехода  $\tilde{T}$ :

$$W_{\alpha \rightarrow \beta} = |T_{\beta\alpha}|^2. \quad (1.20)$$

Возможное состояние системы называют каналом реакции: например,  $|\alpha\rangle$  - входной канал,  $|\beta\rangle$  - выходной канал. Очевидно, элементы матрицы рассеяния  $S_{\beta\alpha}$  описывают связь между различными каналами в системе. В случае упругого рассеяния входной канал и выходной канал совпадают ( $|\alpha\rangle = |\beta\rangle$ ). Если же входной канал отличается от выходного ( $|\alpha\rangle \neq |\beta\rangle$ ), то имеет место неупругое рассеяние или же реакция.

Наглядную картину временного развития процесса можно получить, рассматривая только процессы рассеяния, при которых природа взаимодействующих частиц не изменяется ( $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}'_0$  и  $U = U'$ ). В этом случае матрицу рассеяния можно непосредственно связать с оператором временного сдвига (эволюции) в представлении взаимодействия.

## Лекция № 2

### §2. Представление Шредингера.

Подставляя выражение для  $\Psi(\vec{r}, t)$  из (1.4) в уравнение Шредингера (1.3), получим уравнение для оператора  $\mathcal{V}(t, t_0)$ :

$$i\hbar \frac{\partial \mathcal{V}(t, t_0)}{\partial t} = H \mathcal{V}(t, t_0) \quad (2.1)$$

при условии  $\mathcal{V}(t=0, t_0=0) = 1$ , следующего из (1.5). Если оператор  $\mathcal{H}$  не зависит от времени явно, то решение уравнения (2.1) можно формально записать в виде

$$\mathcal{K}(t) = \mathcal{K}(0) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}, \quad (2.2)$$

где экспонента понимается в смысле разложения в степенной ряд. Например,

$$e^{i\alpha \mathcal{K}} = 1 + i\alpha \mathcal{K} + \frac{(i\alpha)^2}{2} \mathcal{K}^2 + \dots \quad (2.3)$$

Оператор  $\mathcal{K}(t)$  является, очевидно, унитарным (вытекает из эрмитовости  $\mathcal{H}$ ):

$$\mathcal{K}^\dagger(t) \mathcal{K}(t) = 1. \quad (2.4)$$

Например, покажем, что матрица  $R = e^{iF}$ , где  $F$  - произвольная эрмитова матрица, - унитарная матрица. Непосредственным вычислением, легко проверить, что матрицей обратной  $R$  служит матрица  $R^{-1} = e^{-iF}$ . С другой стороны для матрицы сопряженной к  $R$  согласно (2.3) имеем:

$$R^\dagger = (1 + iF - \frac{1}{2} F^2 + \frac{i}{3!} F^3 - \dots)^\dagger = (1 - iF + \frac{1}{2} F^2 - \frac{i}{3!} F^3 + \dots) = e^{-iF},$$

так как  $F^\dagger = F$ . Таким образом,  $R^\dagger = R^{-1}$  и следовательно, матрица  $R$  унитарна.

Унитарность преобразования  $\mathcal{K}(t)$  также следует из условия сохранения во времени условия нормировки волновой функции:

$$\int \Psi^*(\vec{r},0)\Psi(\vec{r},0)dV = \int \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)dV = \int \mathcal{U}^*\Psi^*(\vec{r},0)\mathcal{U}\Psi(\vec{r},0)dV = \int (\mathcal{U}^+\mathcal{U}\Psi(\vec{r},0))^* \Psi(\vec{r},0)dV.$$

Таким образом, описание эволюции системы во времени сводится к тому, что волновая функция  $\Psi(\vec{r},t)$  или соответствующий ей вектор состояния  $|\psi(\vec{r},t)\rangle$  в каком-либо базисе Гильбертова пространства изменяется во времени. Это изменение можно характеризовать при помощи унитарного оператора  $\mathcal{U}(t)$ , действующего на начальную волновую функцию  $\Psi(\vec{r},t=0)$  и в каждый момент превращающего ее в функцию  $|\psi(\vec{r},t)\rangle$ . При этом операторы, характеризующие систему, например, операторы координаты и импульса  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  или любые операторы  $\hat{F}(\hat{X},\hat{P})$ , являющиеся какой-либо функцией операторов  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$ , не изменяются во времени явно.

Отметим, что любое унитарное преобразование сохраняет вид операторных и матричных уравнений. Действительно, преобразование  $S$  какой либо матрицы  $R$  задается выражением  $R' = S^+RS$ . Пусть имеем матричные уравнения  $F+D = R$  и  $PL = T$ . Умножая уравнения слева на  $S^+$  и справа на  $S$  получаем  $S^+FS + S^+DS = S^+RS$  и  $S^+PSS^+LS = S^+TS$  (во втором уравнении мы воспользовались унитарностью преобразования  $S^+ = S^{-1}$ ), таким образом мы получили  $F' + D' = R'$  и  $P'L' = T'$ . Итак, если имеется какая-либо функция матриц  $f(F, R, \dots)$ , то после унитарного преобразования получим ту же функцию от преобразованных матриц:  $f(F', R', \dots) = f(F, R, \dots)$ . Отсюда, в частности, следует сохранение скалярного произведения при унитарном преобразовании Гильбертова пространства, а следовательно, и длины векторов. Впрочем, это легко доказывается непосредственно. Пусть имеем скалярное произведение двух векторов  $|a\rangle$  и  $|b\rangle$ :  $\langle a|b\rangle$ . Тогда после преобразования получаем:  $|a'\rangle = S|a\rangle$ ,  $|b'\rangle = S|b\rangle$  и  $\langle a'|b'\rangle = \langle a|S^+S|b\rangle = \langle a|b\rangle$ .

Таким образом, если характеризовать состояние системы с помощью Гильбертова пространства, то ход эволюции системы можно описать следующим образом: пусть задана система ортов в пространстве Гильберта. В качестве системы ортов обычно выбирается система собственных функций, являющаяся общей для операторов, образующих полный набор динамических переменных для данной системы. В начальный момент времени состояние

системы задается вектором состояния  $|\psi(\vec{r}, t = 0)\rangle$ . Эволюция системы во времени отвечает повороту вектора состояния  $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$  в Гильбертовом пространстве. При этом его длина  $\sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}$  имеет постоянное значение. Такое описание системы, при котором волновая функция изменяется во времени, а операторы от времени не зависят, носит название представления Шредингера. Заметим, что термин «представление» имеет при этом более общий смысл и характеризует именно способ описания изменения состояния во времени. В частности, можно задать состояние системы в Шредингеровском координатном представлении, Шредингеровском импульсном представлении, Шредингеровском энергетическом представлении и т.д. Как сами операторы  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  и вообще любой  $\hat{F}$ , так и операторы соответствующих производных по времени  $\dot{\hat{X}}$ ,  $\dot{\hat{P}}$  и  $\dot{\hat{F}}$  в представлении Шредингера не изменяются во времени (мы предполагаем, что нет нестационарных внешних полей). Действительно, например, оператор  $\dot{\hat{F}}$ , так как  $\hat{F}$  в представлении Шредингера явно не зависит от времени, имеет вид:

$$\dot{\hat{F}} = [\hat{H}, \hat{F}]$$

и не изменяется во времени, так как не изменяются операторы  $\hat{H}$  и  $\hat{F}$ .

Не представляет труда и матричные элементы оператора  $\dot{\hat{F}}$ :

$$\dot{F}_{mn} = [\hat{H}, \hat{F}]_{mn}.$$

Так, например, в энергетическом Шредингеровском представлении, то есть в таком представлении, в котором диагональна матрица  $\hat{H}$ :

$$\dot{F}_{mn} = \frac{i}{\hbar} (H_{mm} F_{mn} - F_{mn} H_{nn}) = i\omega_{mn} F_{mn},$$

где

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n), \quad F_{mn} = \langle m | \hat{F} | n \rangle.$$

### Лекция № 3

#### §3. Квантовая механика в Шредингеровском $\hat{F}$ – представлении

При решении конкретных задач удобно переходить от абстрактных векторов состояний  $|\psi\rangle$  и операторов динамических переменных  $\hat{F}$  к некоторым совокупностям чисел. Для этого достаточно выбрать в гильбертовом пространстве некоторый ортонормированный базис и сопоставить векторам совокупности их компонент (координат), а операторам – совокупности их матричных элементов. Базисы можно выбрать по-разному, в соответствии с чем мы будем получать различные квантово-механические представления.

С физической точки зрения наиболее удобным является базис, образованный собственными векторами линейного самосопряженного оператора  $\hat{F}$ , соответствующего некоторой динамической переменной. Именно в этом смысле говорят о координатном, импульсном, энергетическом и других представлениях в квантовой механике.

Итак, выбираем некоторую динамическую переменную и рассматриваем соответствующий ей линейный эрмитов оператор  $\hat{F}$ .

Будем предполагать, что спектр выбранного оператора  $\hat{F}$  не содержит вырожденных собственных значений. Такое предположение делается исключительно ради упрощения записи формулируемых ниже результатов. Кроме того, будем предполагать, что спектр оператора  $\hat{F}$  является или чисто дискретным, или чисто непрерывным. Решим задачу на собственные значения этого оператора:

$$\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle. \quad (3.1)$$

Построим из собственных векторов  $|f\rangle$  ортонормированный базис. Это означает, что выполняются условия:

$$\langle f'|f''\rangle = \delta_{f'f''} \quad (3.2)$$

в случае дискретного спектра, или

$$\langle f'|f''\rangle = \delta(f' - f'') \quad (3.3)$$

в случае непрерывного спектра. Кроме того, базис удовлетворяет условию полноты

$$\sum_f |f\rangle\langle f| = I \quad (3.4)$$

в случае дискретного спектра, или

$$\int_f |f\rangle\langle f| = I \quad (3.5)$$

в случае непрерывного спектра.

Любой вектор  $|\psi\rangle$  гильбертова пространства волновых функций можно разложить по базисным ортам

$$|\psi\rangle = \sum_f \psi_f |f\rangle, \quad (3.6)$$

или

$$|\psi\rangle = \int \psi_f df, \quad (3.7)$$

причем в обоих случаях

$$\psi_f = \langle f | \psi \rangle. \quad (3.8)$$

Совокупность чисел  $\psi_f$  (дискретная или непрерывная), то есть компонентов (координат) вектора  $|\psi\rangle$  в выбранном базисе, определяет этот вектор однозначным образом. Она называется волновой функцией состояния  $|\psi\rangle$  в F-представлении.

Произвольному оператору Q, переводящему вектор  $|\psi\rangle$  в вектор  $|\varphi\rangle$

$$|\varphi\rangle = \mathfrak{Q} |\psi\rangle \quad (3.9)$$

сопоставляется в F-представлении матрица

$$Q_{f'f''} = \langle f' | \mathfrak{Q} | f'' \rangle. \quad (3.10)$$

Она переводит компоненты вектора  $|\psi\rangle$  в компоненты вектора  $|\varphi\rangle$ :

$$\begin{aligned} \varphi_{f'} &= \langle f' | \varphi \rangle = \langle f' | (\mathfrak{Q} |\psi\rangle) \rangle = \langle f' | \mathfrak{Q} | \psi \rangle = \\ &= \sum_f \langle f' | \mathfrak{Q} | f \rangle \langle f | \psi \rangle = \sum_f Q_{f'f} \psi_f \end{aligned}, \quad (3.11)$$

или

$$\varphi_{f'} = \int Q_{f'f} \psi_f df, \quad (3.12)$$

то есть в случае непрерывного спектра матрица (3.10) является фактически ядром интегрального оператора.

В своем собственном базисе (в базисе из собственных векторов оператора  $\mathfrak{F}$ ) оператор  $\mathfrak{F}$  представляется диагональной матрицей

$$F_{f'f''} = f'' \delta_{f'f''}, \quad (3.13)$$

или

$$F_{f'f''} = f'' \delta(f' - f''). \quad (3.14)$$

Действительно, например, для дискретного спектра, используя (3.1) и (3.2), получим

$$F_{f'f''} = \langle f' | \mathfrak{F} | f'' \rangle = \langle f' | f'' | f'' \rangle = f'' \langle f' | f'' \rangle = f'' \delta_{f'f''}. \quad (3.15)$$



$$\begin{vmatrix} (Q_{11} - q) & Q_{12} & \dots & Q_{1n} \\ Q_{21} & (Q_{22} - q) & \dots & Q_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ Q_{n1} & Q_{n2} & \dots & (Q_{nn} - q) \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{III})$$

Раскрывая детерминант, получим уравнение  $n$  – ой степени (характеристическое уравнение) для собственных значений  $q$ .

Подставляя корни этого уравнения в систему (II) и решая ее, мы найдем собственные вектора оператора  $\hat{Q}$

$$|q\rangle = \{q_1, q_2, \dots, q_n\},$$

соответствующие некоторому собственному значению  $q$ .

Среднее значение наблюдаемой физической величины  $Q$  в состоянии  $|\psi\rangle$  в случае дискретного спектра равно

$$\bar{Q}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle = \sum_{f', f''} \langle\psi|f'\rangle \langle f'|\hat{Q}|f''\rangle \langle f''|\psi\rangle = \sum_{f', f''} \psi_{f''}^* Q_{f'f''} \psi_{f''}. \quad (3.20)$$

В случае непрерывного спектра имеем

$$\bar{Q}|\psi\rangle = \int Q_{f'f''} \psi_{f'}^* \psi_{f''} df' df''. \quad (3.21)$$

Эти формулы приобретают особенно простой вид для самого оператора  $\hat{F}$ . Действительно, учитывая (3.13) и (3.14), получим

$$\bar{F}|\psi\rangle = \sum_f f |\psi_f|^2, \quad (3.22)$$

или

$$\bar{F}|\psi\rangle = \int f |\psi_f|^2 df. \quad (3.23)$$

Согласно одной из аксиом квантовой механики вероятность обнаружить при измерении динамической переменной  $F$  в состоянии  $|\psi\rangle$  значение  $f$  равна

$$W_\psi(f) = |\langle f|\psi\rangle|^2 = |\psi_f|^2. \quad (3.24)$$

Аналогичная вероятность для динамической переменной  $Q$  задается следующим выражением (в случае дискретного спектра оператора  $\hat{F}$ )

$$W_\psi(q) = |\langle q|\psi\rangle|^2 = \left| \sum_f \langle q|f\rangle \langle f|\psi\rangle \right|^2 = \left| \sum_f q_f^* \psi_f \right|^2. \quad (3.25)$$

В случае непрерывного спектра аналогично получим для плотности вероятности

$$W_\psi(q) = \left| \int q_f^* \psi_f df \right|^2. \quad (3.26)$$

Часто приходится переходить от одного представления к другому, например от  $F$ -представления к  $G$ -представлению. Этот переход легко осуществляется путем использования условия

полноты. Выведем соответствующие формулы, считая, что спектр оператора  $\mathbb{F}$  дискретен. Для волновой функции  $|\psi\rangle$  имеем

$$\psi_g = \langle g | \psi \rangle = \sum_f \langle g | f \rangle \langle f | \psi \rangle = \sum_f g_f^* \psi_f, \quad (3.27)$$

где  $\psi_f$  - волновая функция в F-представлении,  $\psi_g$  - волновая функция в G-представлении,

$$\mathbb{F}|f\rangle = f|f\rangle \quad \text{и} \quad \mathbb{G}|g\rangle = g|g\rangle.$$

А для матрицы оператора получаем

$$G_{g'g''} = \langle g' | \mathbb{G} | g'' \rangle = \sum_{f', f''} \langle g' | f' \rangle \langle f' | \mathbb{G} | f'' \rangle \langle f'' | g'' \rangle = \sum_{f', f''} (g_{f'}^*) G_{f', f''} g_{f''} \quad (3.28)$$

Совершенно аналогично выводятся формулы в случае непрерывного спектра оператора  $\mathbb{F}$ . Таким образом,

$$\psi_g = \sum_f g_f^* \psi_f, \quad (3.29a)$$

или

$$\psi_g = \int g_f^* \psi_f df, \quad (3.29b)$$

а также

$$G_{g'g''} = \sum_{f', f''} (g_{f'}^*) g_{f''} G_{f', f''}, \quad (3.30a)$$

или

$$G_{g'g''} = \int (g_{f'}^*) g_{f''} G_{f', f''} df' df''. \quad (3.30b)$$

Таким образом, мы видим, что для перехода от F-представления к G-представлению достаточно знать собственные волновые функции оператора  $\mathbb{G}$

$$g_f = \langle f | g \rangle$$

в F-представлении. Совокупность таких собственных векторов оператора  $\mathbb{G}$  можно представить в виде матрицы:

$$C = \begin{pmatrix} \langle f_1 | g_1 \rangle & \langle f_1 | g_2 \rangle & \dots & \langle f_1 | g_n \rangle & \dots \\ \langle f_2 | g_1 \rangle & \langle f_2 | g_2 \rangle & \dots & \langle f_2 | g_n \rangle & \dots \\ \vdots & & & & \\ \langle f_n | g_1 \rangle & \langle f_n | g_2 \rangle & \dots & \langle f_n | g_n \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Напомним, что собственные вектора оператора  $\mathbb{G}$  находятся путем решения задачи на собственные значения и собственные функции (см. (3.18) и (3.19)) в F-представлении:

$$\sum_f G_{ff'} g_{f'} = g g_f \quad (3.32)$$

в случае дискретного спектра оператора  $\hat{F}$ , или

$$\int G_{ff'} g_{f'} df' = g g_f \quad (3.33)$$

в случае чисто непрерывного спектра оператора  $\hat{F}$ .

## Лекция № 4

### §4. Шредингеровское координатное представление

Рассмотрим наиболее часто используемое в квантовой механике представление – координатное, или  $x$  – представление. Ради простоты будем считать, что имеется одна частица, которая движется вдоль оси  $Ox$ , так что ее положение полностью определяется одной координатой  $x$ . Этой координате сопоставляется линейный Эрмитов оператор  $\hat{X}$ . Из физических соображений ясно, что частица в принципе может находиться в любой точке прямой  $Ox$ , т.е. может иметь любую координату  $x$ . Это означает, что оператор  $\hat{X}$  должен обладать чисто непрерывным спектром, т.е. уравнение на собственные значения и собственные функции

$$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle \quad (4.1)$$

имеет решение при любом вещественном  $x$ .

Выбрав в качестве базисных ортов векторы  $|x\rangle$ , т.е. собственные функции оператора  $\hat{X}$ , мы и получим **координатное представление**. В силу непрерывности спектра оператора  $\hat{X}$  условия ортонормированности и полноты базиса записываются в виде:

$$\langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'') \quad (4.2)$$

и

$$\int |x\rangle \langle x| dx = I. \quad (4.3)$$

Состояние в  $x$  – представление описывается непрерывной совокупностью компонентов (координат в выбранном базисе) волнового вектора

$$\psi_x = \langle x | \psi \rangle. \quad (4.4)$$

Эту непрерывную совокупность координат волнового вектора можно обозначить через непрерывную функцию

$$\psi_x = \langle x | \psi \rangle = \psi(x), \quad (4.5)$$

которую в квантовой механике традиционно и называют волновой функцией или  $\psi$  – функцией.

Произвольному оператору  $\hat{F}$  в координатном представлении соответствует непрерывная матрица

$$F_{x'x''} = \langle x' | \hat{F} | x'' \rangle. \quad (4.6)$$

В соответствии с общими правилами (см. (3.12)) она действует на волновую функцию  $\psi(x)$  по закону

$$\varphi(x) \equiv \varphi_x = \int F_{xx'} \psi_{x'} dx' \equiv \int F_{xx'} \psi(x') dx'. \quad (4.7)$$

В частности аналогично (3.14) матрица оператора координаты диагональна:

$$X_{x'x''} = x' \delta(x' - x''). \quad (4.8)$$

Поэтому на волновую функцию она действует следующим образом:

$$\varphi(x) = \int x \delta(x - x') \psi(x') dx' = x \psi(x), \quad (5.9)$$

т.е. просто умножает ее на  $x$ , в полном соответствии с правилами квантовой механики.

Для нахождения матрицы оператора импульса в координатном представлении (в  $x$  - представлении) воспользуемся перестановочным соотношением

$$\hat{X} \hat{P} - \hat{P} \hat{X} = i \hbar \hat{E}. \quad (4.10)$$

Действуя операторами, фигурирующими в его левой и правой частях, на вектор  $|x''\rangle$  и умножая результат слева на вектор  $\langle x'|$ , получим

$$\langle x' | \hat{X} \hat{P} | x'' \rangle - \langle x' | \hat{P} \hat{X} | x'' \rangle = i \hbar \langle x' | x'' \rangle. \quad (4.11)$$

Воспользовавшись уравнением на собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{X}$

$$\hat{X} |x\rangle = x |x\rangle \quad (4.12)$$

и сопряженным ему уравнением

$$(\hat{X} |x\rangle = x |x\rangle)^+ = \langle x | \hat{X}^+ = x^* \langle x | = \langle x | \hat{X} = x \langle x | \quad (4.13)$$

(здесь мы воспользовались эрмитовостью оператора  $\hat{X}$ ), а также условием ортонормированности собственных векторов оператора  $\hat{X}$ , получим

$$(x' - x'') \langle x' | \hat{P} | x'' \rangle = i \hbar \delta(x' - x''). \quad (4.14)$$

Теперь вспомним основные свойства обобщенной функции  $\delta(x)$ :

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0, \\ \infty, & x = 0, \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) f(x) dx = f(a), \quad (4.15)$$

$$\delta(-x) = \delta(x), \quad (4.16)$$

$$x \delta(x) = 0, \quad (4.17)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x) f(x) dx = -f'(0), \quad (4.18)$$

$$\delta'(-x) = -\delta'(x), \quad (4.19)$$

$$x \delta'(-x) = -\delta'(x), \quad (4.20)$$

где ' означает дифференцирование по  $x$ .

Например, докажем (4.17) и (4.18). Воспользовавшись (4.15) для (4.17) получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [x \delta(x)] f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) [x f(x)] dx = x f(x) \Big|_{x=0} = 0.$$

Для доказательства (4.18) выполним в левой его части интегрирование по частям:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) d[\delta(x)] = f(x) \delta(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f'(x) dx = -f'(0).$$

Далее, учитывая свойство  $\delta$ -функции (4.20), получим, что решение алгебраического уравнения

$$x f(x) = \delta(x),$$

имеет вид

$$f(x) = -\delta'(x). \quad (4.21)$$

Поэтому, учитывая (4.21), из уравнения (4.14) получаем

$$P_{x'x''} = \langle x' | \hat{P} | x'' \rangle = -i \hbar \delta'(x' - x''). \quad (4.22)$$

Учтем теперь свойство нечетности функции  $\delta'(x)$  (4.19) и основное ее свойство (4.18). Тогда получим следующий закон действия оператора импульса на волновую функцию:

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \int P_{xx'} \psi_{x'} dx' = -i \hbar \int \delta'(x - x') \psi(x') dx' = \\ &= i \hbar \int \delta'(x' - x) \psi(x') dx' = -i \hbar \frac{d\psi(x)}{dx}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

то есть он сводится (с точностью до множителя) к ее дифференцированию, в полном соответствии с традиционным определением оператора импульса.

Учитывая (4.23) и основное свойство  $\delta$ -функции (4.15) матрицу оператора импульса (4.22) можно записать в виде

$$P_{x'x''} = -i\hbar \delta(x' - x'') \frac{d}{dx'}. \quad (4.24)$$

Динамические переменные в квантовой механике, так же как и в классической, можно выразить через координату и импульс. Это означает, что оператор  $\hat{F}$  любой такой переменной должен выражаться, через операторы  $\hat{X}$  и  $\hat{P}$ . А так как матрицы последних, как видно из (4.8) и (4.24), содержат в координатном представлении  $\delta$ -функцию, поэтому и для матрицы любой динамической переменной  $F_{x'x''}$  можно написать

$$F_{x'x''} = \delta(x' - x'') \hat{F}, \quad (4.25)$$

где оператор  $\hat{F}$  включает умножение на  $x'$  и дифференцирование по этой переменной. Подставляя в общий закон, определяющий действие матрицы оператора на волновую функцию, выражение (4.25) и учитывая основное свойство  $\delta$ -функции, можно этот закон представить не в матричном, а в дифференциальном виде:

$$\varphi(x) = \hat{F}\psi(x). \quad (4.26)$$

Например, из (4.9) и (4.23) очевидно, что

$$\hat{X} = x, \quad \text{и} \quad \hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (4.27)$$

Среднее значение (см. (3.21)) динамической переменной  $F$  в состоянии  $|\psi\rangle$ , используя (4.25), запишем в координатном представлении как

$$\bar{F}|\psi\rangle = \int \psi^*(x) \hat{F}\psi(x) dx. \quad (4.28)$$

Согласно (3.24) плотность вероятности обнаружить частицу в точке прямой с координатой  $x$  равна

$$W_\psi(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = |\psi(x)|^2, \quad (4.29)$$

откуда становится ясным физический смысл  $\psi$ -функции.

Вычисляя по общей формуле (3.26) вероятность получить при измерении динамической переменной  $F$  в состоянии  $|\psi\rangle$  ее значение  $f$ , будем иметь

$$W_\psi(f) = \left| \int \psi_f^*(x) \psi(x) dx \right|^2. \quad (4.30)$$

В заключение вычислим собственные функции операторов координаты и импульса в  $x$ -представлении. Для оператора координаты уравнение на собственные значения (4.1) может быть записано в виде

$$x\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x), \quad \text{или} \quad (x - x_0)\psi_{x_0}(x) = 0. \quad (4.31)$$

Учитывая, что согласно свойству (4.17)  $\delta$ -функции  $x\delta(x) = 0$ ,

из (4.31) сразу получаем

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0). \quad (4.32)$$

Уравнение на собственные значения оператора импульса в  $x$ -представлении имеет вид

$$-i\hbar \frac{d\psi_p(x)}{dx} = p\psi_p(x).$$

При любом вещественном  $p$  оно имеет решение в виде плоской волны

$$\psi_p(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

Определяя константу  $A$  из условия нормировки (3.3), которое в рассматриваемом случае записывается как

$$\langle p' | p'' \rangle = \int \langle p' | x \rangle \langle x | p'' \rangle dx = \int \psi_{p'}^*(x) \psi_{p''}(x) dx = \delta(p' - p'')$$

получим

$$|A|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(p'' - p')x} dx = \delta(p' - p''). \quad (4.33)$$

Далее рассмотрим следующие свойства разложения  $\delta$ -функции в интеграл Фурье.

Напомним, что практически любую функцию  $f(x)$  можно разложить в интеграл Фурье:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk, \quad (4.34)$$

где Фурье-образ  $\tilde{f}(k)$ :

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \quad (4.35)$$

Оказывается, что в интеграл Фурье можно разложить и  $\delta$ -функцию

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk, \quad (4.36)$$

$$\tilde{\delta}(k) = \frac{1}{2\pi}. \quad (4.37)$$

Формально выражение (4.37) можно получить, подставив  $\delta(x)$  в (4.35). Однако строгое доказательство проводится в теории обобщенных функций.

Таким образом, учитывая (4.36) и также свойство четности  $\delta$ -функции (4.16), для (4.33), получим

$$\begin{aligned} |A|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(p''-p'')x} dx &= \delta(p' - p'') = \delta(p'' - p') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(p''-p')} dk = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(\hbar x)(p''-p')} d(\hbar x) \end{aligned} \quad (4.38)$$

Откуда следует, что

$$|A|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}. \quad (4.39)$$

Вспоминая теперь, что  $\psi$ -функция определена с точностью до множителя, модуль которого равен единице, можно положить

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

так что собственная функция оператора импульса, нормированная условием (3.3) и отвечающая его собственному значению  $p$ , равна

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}. \quad (4.40)$$

## Лекция № 5

### §5. Шредингеровское импульсное представление

При решении конкретных задач иногда оказывается полезным импульсное представление, базис в котором образуют собственные вектора  $|p\rangle$  оператора импульса  $\hat{P}$ :

$$\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle. \quad (5.1)$$

Так же, как и в координатном случае, спектр оператора импульса является чисто непрерывным, так что условия ортонормированности и полноты базиса записываются в виде:

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p'') \quad (5.2)$$

и

$$\int |p\rangle\langle p| dp = I. \quad (5.3)$$

В  $p$ -представлении состояния описываются волновыми функциями

$$\psi_p = \langle p | \psi \rangle = \tilde{\psi}(p). \quad (5.4)$$

Квадрат модуля такой функции определяет плотность вероятности получить при измерении импульса частицы в данном состоянии значение  $p$ .

Рассуждая точно так же, как в Лекции №4, мы увидим, что операторы координаты и импульса, действующие на волновую функцию в  $p$ -представлении, имеют вид

$$\hat{X} = i\hbar \frac{d}{dp}, \quad \hat{P} = p. \quad (5.5)$$

Переход от координатного представления к импульсному представлению осуществляется посредством общих формул (3.29b) и (3.30b) с помощью собственных функций оператора импульса  $\hat{P}$ , вычисленных в  $x$ -представлении:

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle = \int \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int \psi_p^*(x) \psi(x) dx \quad (5.6)$$

и

$$\begin{aligned} F_{p'p''} &\equiv \langle p' | \hat{P} | p'' \rangle = \int \langle p' | x' \rangle \langle x' | \hat{P} | x'' \rangle \langle x'' | p'' \rangle dx' dx'' = \\ &= \int \psi_{p'}^*(x') F_{x'x''} \psi_{p''}(x'') dx' dx'' \end{aligned} \quad (5.7)$$

соответственно.

Учитывая, что эти собственные функции в  $x$ -представлении задаются формулой (4.40), получим, что волновая функция  $\tilde{\psi}(p)$  в  $p$ -представлении выражается через волновую функцию  $\psi(x)$  в  $x$ -представлении соотношением

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx, \quad (5.8)$$

то есть посредством обычного преобразования Фурье.

## Лекция № 6

### §6. Шредингеровское энергетическое представление

Обратимся теперь к временному уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(\vec{r}, t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(\vec{r}, t)\rangle. \quad (6.1)$$

Если гамильтониан  $\mathcal{H}$  явно от времени не зависит, то это уравнение можно решать методом разделения переменных.

Пусть  $\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(t)\psi(\vec{r})$ , тогда для (6.1) получим

$$i\hbar\psi(\vec{r})\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = \varphi(t)\mathcal{H}\psi(\vec{r}) \quad (6.2)$$

и разделяя переменные

$$i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = \frac{\mathcal{H}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = E = \text{const.} \quad (6.3)$$

Интегрируя первое уравнение, получим

$$\varphi(t) = C e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \text{ где } C = \text{const.} \quad (6.4)$$

Второе уравнение

$$\mathcal{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (6.5)$$

Таким образом, мы получили, что уравнение (6.1) имеет следующую систему частных решений:

$$|\Psi_E(\vec{r}, t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\Psi_E(\vec{r})\rangle, \quad (6.6)$$

где векторы  $|\Psi_E(\vec{r})\rangle$  от времени уже не зависят. Как вектор  $|\Psi_E(\vec{r}, t)\rangle$ , так и вектор  $|\Psi_E(\vec{r})\rangle$  являются собственными векторами гамильтониана соответствующими его собственному значению  $E$ :

$$\mathcal{H}|\Psi_E(\vec{r}, t)\rangle = E|\Psi_E(\vec{r}, t)\rangle \quad (6.7)$$

и

$$\mathcal{H}|\Psi_E(\vec{r})\rangle = E|\Psi_E(\vec{r})\rangle. \quad (6.8)$$

Ввиду явно выделенной роли гамильтониана в квантовой механике, здесь часто бывает удобным использование энергетического представления, базис в котором образуют собственные векторы  $|\Psi_E\rangle$  этого оператора. Особенно полезным оно оказывается в тех случаях, когда спектр гамильтониана чисто дискретный, что в дальнейшем мы и будем предполагать. Кроме того, предположим, что каждое собственное значение – не вырождено.

Обозначим собственный вектор  $|\Psi_{E_n}\rangle$  гамильтониана, соответствующий  $n$  – ному собственному значению  $E_n$ , ради краткости через  $|n\rangle$ :

$$\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (6.9)$$

Тогда условия ортонормированности и полноты базиса в энергетическом представлении будут записываться в виде

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \quad (6.10)$$

и

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = I. \quad (6.11)$$

Любое состояние  $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$  в энергетическом представлении описывается совокупностью компонентов (координат в выбранном базисе)

$$\langle n|\Psi(t)\rangle \equiv c_n(t), \quad (6.12)$$

которая является волновой функцией этого состояния в выбранном представлении. Операторам динамических переменных сопоставляются матрицы

$$F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle, \quad (6.13)$$

которые от времени не зависят. Согласно (3.13) матрица гамильтониана в энергетическом представлении – диагональна:

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn}. \quad (6.14)$$

Перепишем уравнение Шредингера (6.1) в энергетическом представлении. Для этого умножим его слева скалярно на  $\langle n|$  и воспользуемся в правой части условием полноты (6.11):

$$i\hbar \frac{\partial \langle n|\Psi(\vec{r}, t)\rangle}{\partial t} = \langle n|\hat{H}|\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \sum_m \langle n|\hat{H}|m\rangle \langle m|\Psi(\vec{r}, t)\rangle. \quad (6.15)$$

Вводя обозначения (6.12), (6.13) и учитывая диагональность матрицы гамильтониана (6.14), уравнение Шредингера можно представить в следующем виде:

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t). \quad (6.16)$$

Оно имеет решение

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (6.17)$$

В соответствии с общей формулой (3.20), среднее значение динамической переменной  $F$  в состоянии  $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$  равно:

$$\bar{F} \Big|_{\Psi} = \sum_{m,n} F_{mn} c_m^*(t) c_n(t). \quad (6.18)$$

Для самого гамильтониана это выражение приобретает особенно простой вид:

$$\bar{H} \Big|_{\Psi} = \sum_n E_n |c_n(t)|^2 = \sum_n E_n |c_n(0)|^2, \quad (6.19)$$

где при переходе к последней форме записи использовано соотношение (6.17). Таким образом, среднее значение энергии не

зависит от времени, как это и должно быть, поскольку она является сохраняющейся величиной.

Как следует из общей формулы (3.24), вероятность получить при измерении энергии в состоянии  $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$  ее значение  $E_n$  равна:

$$W_{\Psi}(E_n) = |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2, \quad (6.20)$$

откуда становится ясным физический смысл волновой функции данного состояния в энергетическом представлении.

Иногда приходится иметь дело с матрицами операторов  $\hat{F}$ , вычисленными в базисе, который образуют зависящие от времени векторы (6.6):

$$|n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle. \quad (6.21)$$

В этом случае матрица

$$F_{mn}(t) = \langle m(t) | \hat{F} | n(t) \rangle \quad (6.22)$$

также является зависящей от времени. Очевидно, что

$$F_{mn}(t) = F_{mn} e^{i\omega_{mn}t}, \quad (6.23)$$

где матричные элементы  $F_{mn}$  определяются формулой (6.13) и не зависят от времени, а

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}. \quad (6.24)$$

Величину  $\omega_{mn}$  называют «частотой перехода» между состояниями  $|m\rangle$  и  $|n\rangle$ . Дифференцируя (6.23) по времени получим

$$\frac{dF_{mn}(t)}{dt} = i\omega_{mn}F_{mn}(t) \quad (6.25)$$

и

$$\frac{d^2 F_{mn}(t)}{dt^2} = -\omega_{mn}^2 F_{mn}(t). \quad (6.26)$$

В заключение рассмотрим, как осуществляется переход от координатного представления к энергетическому представлению. Согласно общему правилу (3.29b) для волновой функции получим:

$$c_n(t) = \int \psi_n^*(x) \Psi(x, t) dx, \quad (6.27)$$

где  $\psi_n(x)$  - собственная функция гамильтониана  $\hat{H}$ , действующего в пространстве функций  $\psi(x)$  координатного представления:

$$\hat{H} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x).$$

Для матрицы оператора  $\hat{F}$  согласно (3.30b) получим

$$F_{mn} = \int \psi_m^*(x) F_{xx'} \psi_n(x') dx dx',$$

или учитывая (4.25), окончательно получаем

$$F_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{F} \psi_n(x) dx . \quad (6.28)$$

## Лекция № 7

### §7. Представление Гейзенберга.

В представлении Гейзенберга эволюция системы во времени описывается при помощи операторов, зависящих от времени. При этом сама волновая функция  $\Phi(x)$  считается зависящей только от координат, но не зависящей от времени. Наглядно картину эволюции в представлении Гейзенберга можно представить себе как поворот системы базисных векторов в гильбертовом пространстве относительно неподвижного вектора состояния  $\Phi(x)$ .

Переход к представлению Гейзенберга в общем случае осуществляется с помощью унитарного преобразования обратного к  $\hat{V}(t)$ , заданному выражением (2.2):

$$\Phi(x) = \hat{V}^{-1}(t) \psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, 0), \quad (7.1)$$

где  $\Phi(x)$  - волновая функция (вектор состояния) в представлении Гейзенберга.

Используя выражение (7.1) и учитывая, что

$$\hat{V}^{-1}(t) = \hat{V}^+(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad (7.2)$$

получаем

$$\Phi(x) = \psi(\vec{r}, 0) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \psi(\vec{r}, t). \quad (7.3)$$

В соответствии с общими правилами перехода от одного представления (базиса) к другому произвольный оператор  $\hat{F}$ , заданный в шредингеровском представлении, будет иметь в гейзенберговском представлении (обозначим через  $\hat{F}_H$ ) следующий вид:

$$\hat{F}_H = \hat{V}^+(t) \hat{F} \hat{V}(t) \quad (7.4)$$

или

$$\hat{F}_H = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{F} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (7.5)$$

Действительно, рассмотрим еще раз переход от некоторого F-представления (пусть соответствующий ему базис -  $\psi_m$ ) к некоторому D – представлению (базис -  $\phi_k$ ). Тогда

$$\varphi_k = \sum_{\ell} S_{\ell k} \psi_{\ell}, \quad (7.6)$$

где  $S$  – матрица преобразования от одного базиса к другому. Умножим (7.6) слева на вектор  $\langle \psi_{\ell} |$  и учитывая ортонормированность базиса  $\psi_m$  получим

$$\langle \psi_{\ell} | \varphi_k \rangle = \sum_{\ell} S_{\ell k} \langle \psi_{\ell} | \psi_{\ell} \rangle = S_{\ell k} \quad (7.7)$$

Учитывая ортонормированность обоих базисов и формулу разложения (7.6), получим:

$$\begin{aligned} \delta_{mk} &= \langle \varphi_m | \varphi_k \rangle = \int \varphi_m^* \varphi_k \, dv = \sum_{i, \ell} S_{im}^* S_{\ell k} \int \psi_i^* \psi_{\ell} \, dv = \\ &= \sum_{i, \ell} S_{im}^* S_{\ell k} \delta_{i\ell} = \sum_i S_{im}^* S_{ik} = \sum_i (S^+)_{mi} S_{ik} = \delta_{mk} \end{aligned} \quad (7.8)$$

Или в матричной форме

$$S^+ S = I. \quad (7.9)$$

Производя обратное разложение функций  $\psi_m$  по  $\varphi_k$ , аналогично предыдущему получим:

$$SS^+ = I. \quad (7.10)$$

Следовательно, мы доказали, что  $S$  – унитарна, то есть

$$S^+ = S^{-1}. \quad (7.11)$$

Преобразование от одного представления к другому, осуществляемое унитарной матрицей  $S$ , называется унитарным или каноническим преобразованием. Геометрически оно соответствует некоторому повороту в Гильбертовом пространстве.

Получим соотношения, связывающие произвольные вектора  $\Psi$  в разных базисах. Пусть

$$\Psi = \sum_{\ell} c_{\ell} \psi_{\ell}, \quad c_{\ell} = \langle \psi_{\ell} | \Psi \rangle, \quad (7.12)$$

$$\Psi = \sum_k c'_k \varphi_k, \quad c'_k = \langle \varphi_k | \Psi \rangle, \quad (7.13)$$

$$\varphi_k = \sum_{\ell} S_{\ell k} \psi_{\ell}, \quad S_{\ell k} = \langle \psi_{\ell} | \varphi_k \rangle. \quad (7.14)$$

Тогда

$$\Psi = \sum_{\ell} c_{\ell} \psi_{\ell} = \sum_{\ell, k} c'_k S_{\ell k} \psi_{\ell}. \quad (7.15)$$

Приравнивая выражения при одинаковых  $\psi_{\ell}$ , получаем

$$c_{\ell} = \sum_k S_{\ell k} c'_k. \quad (7.16)$$

Это выражение можно записать в матричном виде, если рассматривать совокупность амплитуд  $c_{\ell}$  и  $c'_k$  как матрицы  $c$  и  $c'$  с одним столбцом (вектор-столбцы):

$$c = Sc'. \quad (7.17)$$

Умножая (7.17) слева на  $S^+$ , получим

$$c' = S^+c. \quad (7.18)$$

Далее покажем, как преобразуется произвольная матрица  $R$  при переходе к другому представлению. Предположим, что в  $F$ -представлении имеет место соотношение

$$b_\ell = \sum_m R_{\ell m} c_m \quad (7.19)$$

или в матричной форме

$$b = Rc. \quad (7.20)$$

При переходе к другому представлению вектора  $c$  и  $b$  преобразуются в  $c'$  и  $b'$  посредством действия матрицы перехода  $S$ .

$$Sb' = b = Rc = RSc'. \quad (7.21)$$

Умножая (7.21) слева на  $S^+$ , получим

$$b' = S^+RSc' = R'c'. \quad (7.22)$$

Таким образом, матрица  $R$  в новом представлении имеет вид

$$R' = S^+RS \quad (7.23)$$

или

$$(R')_{mn} = \sum_{k,\ell} (S^+)_{mk} R_{k\ell} S_{\ell n}. \quad (7.24)$$

Итак, возвращаемся к выражениям (7.4) и (7.5). В начальный момент времени выражения, как для волновых функций, так и для операторов в обоих представлениях (шредингеровском и гейзенберговском) совпадают. Заметим, что оператор  $\hat{H}$  в представлении Гейзенберга будет тот же самый, что и в представлении Шредингера

$$\hat{H}_H = \hat{H}. \quad (7.25)$$

Это сразу следует из следующей формулы

$$\hat{H}_H = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad (7.26)$$

если учесть, что оператор  $\hat{H}$  коммутирует со всеми членами ряда разложения функции  $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$  (см. (2.3)).

Определим матричные элементы оператора  $\hat{H}_H$  с помощью собственных функций оператора  $\hat{H}$  (гейзенберговское энергетическое представление):

$$\begin{aligned}
(F_H)_{mn} &= \sum_{k,\ell} \left( e^{\frac{i}{\hbar} \mathfrak{H} t} \right)_{mk} F_{k\ell} \left( e^{-\frac{i}{\hbar} \mathfrak{H} t} \right)_{\ell n} = e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} F_{mn} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = \\
&= e^{i\omega_{mn} t} F_{mn}
\end{aligned} \tag{7.27}$$

где мы воспользовались диагональностью матрицы гамильтониана в выбранном базисе

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn},$$

и

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}, \quad F_{mn} = \langle m | \mathfrak{F} | n \rangle.$$

Если оператор  $\mathfrak{F}$  является некоторой функцией  $f$  от  $\mathfrak{K}$  и  $\mathfrak{P}$ , то как следует из формулы (7.5), мы получим оператор  $\mathfrak{F}$  в гейзенберговском представлении, беря в этом представлении операторы  $\mathfrak{K}$  и  $\mathfrak{P}$ , то есть

$$\mathfrak{F}_H = f(\mathfrak{K}_H, \mathfrak{P}_H). \tag{7.28}$$

Уравнение движения в гейзенберговском представлении получим, дифференцируя (7.5)

$$\frac{\partial \mathfrak{F}_H}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\mathfrak{H} \mathfrak{F}_H - \mathfrak{F}_H \mathfrak{H}) = [\mathfrak{H}, \mathfrak{F}_H]. \tag{7.29}$$

Если взять матричный элемент от левой и правой части (7.29) по функциям  $\psi_n$ , то получим, аналогично (6.25)

$$\left( \frac{\partial F_H}{\partial t} \right)_{mn} = \frac{\partial (F_H)_{mn}}{\partial t} = i \omega_{mn} (F_H)_{mn}. \tag{7.30}$$

## Лекция № 8

### §8. Представление взаимодействия (представление Дирака)

Представления Шредингера и Гейзенберга не исчерпывают все использующиеся на практике методы описания квантовых систем. Очень часто в квантовой механике приходится иметь дело с системами, гамильтониан которых может быть разбит на две части:

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_0 + \mathfrak{H}', \tag{8.1}$$

где одна из них  $\hat{H}_0$  представляет собой собственно гамильтониан системы, а другая  $\hat{H}'$  описывает взаимодействие данной системы с внешними полями или другими системами.

В этом случае часто оказывается удобным использовать так называемое представление взаимодействия, введенное Дираком.

Представление взаимодействия является в некотором смысле промежуточным между представлениями Шредингера и Гейзенберга. Именно, определим волновую функцию в представлении взаимодействия соотношением

$$\varphi_B(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \psi(\vec{r}, t), \quad (8.2)$$

где  $\psi(\vec{r}, t)$  - волновая функция в представлении Шредингера.

Аналогично предыдущему (см. (7.4)), произвольный оператор в представлении взаимодействия определяется следующим соотношением

$$\hat{F}_B = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{F} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}, \quad (8.3)$$

где  $\hat{F}_B$  - какой-либо оператор в представлении Шредингера.

Отметим, что в отличие от (7.3) и (7.5), в формулы преобразования (8.2) и (8.3) входит не полный гамильтониан, а лишь гамильтониан системы  $\hat{H}_0$  без взаимодействия  $\hat{H}'$ .

Получим временное уравнение Шредингера в представлении взаимодействия. Для этого продифференцируем по времени соотношение (8.2) и воспользуемся уравнением Шредингера в шредингеровском представлении:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \varphi_B(\vec{r}, t)}{\partial t} &= i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left[ e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \right] \right\} \psi(\vec{r}, t) + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \left( i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \right) = \\ &= -\hat{H}_0 \varphi_B(\vec{r}, t) + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} (\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi(\vec{r}, t) = -\hat{H}_0 \varphi_B(\vec{r}, t) + \hat{H}_0 \varphi_B(\vec{r}, t) + \\ &+ e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{H}' \psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{H}' e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H}'_B \varphi_B(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Итак, получили уравнение Шредингера в представлении взаимодействия:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_B(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}'_B \varphi_B(\vec{r}, t) \quad (8.4)$$

Таким образом, мы получили традиционный вид уравнения Шредингера, но с гамильтонианом  $\hat{H}'_B$ . Уравнение (8.4) определяет

временную эволюцию волновой функции. Эволюцию во времени оператора, в представлении взаимодействия, описывает соотношение, которое можно получить дифференцированием по времени соотношения (8.3):

$$\frac{\partial \hat{F}_B}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}_0 \hat{F}_B - \hat{F}_B \hat{H}_0) = [\hat{H}_0 \hat{F}_B]. \quad (8.5)$$

Отметим, что оператор  $\hat{H}_0$  имеет один и тот же вид, как в представлении Шредингера, так и в представлении взаимодействия.

Если какой-либо оператор  $\hat{F}$  в представлении Шредингера функционально зависит от операторов  $\hat{X}$  и  $\hat{p}$ , то есть  $\hat{F} = f(\hat{X}, \hat{p})$ , то аналогично (7.28)

$$\hat{F}_B = f(\hat{X}_B, \hat{p}_B), \quad (8.6)$$

так как при унитарных преобразованиях сохраняются функциональные связи между операторами, или между соответствующими им матрицами.

Итак, мы видим, что в представлении взаимодействия зависимость от времени волновой функции определяется оператором взаимодействия  $\hat{H}'_B$ , а зависимость от времени операторов определяется оператором системы  $\hat{H}_0$ .

## Лекция № 9

### §9. Оператор эволюции (оператор временного сдвига) и оператор рассеяния (S-оператор) в представлении взаимодействия

Если рассматривается система, гамильтониан которой может быть разбит на две части:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (9.1)$$

где одна из них  $\hat{H}_0$  представляет собой собственно гамильтониан системы, а другая  $\hat{H}'$  описывает взаимодействие данной системы с внешними полями или другими системами, то для нахождения явного вида оператора эволюции и оператора рассеяния, которые были введены в лекции № 1, удобно воспользоваться представлением взаимодействия.

Волновая функция в представлении взаимодействия определяется уравнением (8.4). Оператор эволюции (или оператор временного сдвига)  $\hat{V}(t, t_0)$ , который по определению переводит

волновую функцию, заданную в некоторый момент времени  $t_0$ , в волновую функцию в момент времени  $t$ , в представлении взаимодействия можно записать следующим образом:

$$\varphi_B(t) = \hat{\mathcal{V}}_B(t, t_0) \varphi_B(t_0), \quad (9.2)$$

так как унитарные преобразования сохраняют уравнения.

Подставляя (9.2) в уравнение Шредингера в представлении взаимодействия (8.4), получим

$$i \hbar \frac{\partial \hat{\mathcal{V}}_B(t, t_0)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}'_B \hat{\mathcal{V}}_B(t, t_0), \quad (9.3)$$

а также для начального значения оператора эволюции можем написать

$$\hat{\mathcal{V}}_B(t_0, t_0) = 1. \quad (9.4)$$

Таким образом, получили дифференциальное уравнение (9.3) относительно  $\hat{\mathcal{V}}(t, t_0)$  с начальным условием (9.4), то есть, получили задачу Коши. Решение можно записать следующим образом:

$$\hat{\mathcal{V}}_B(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{\mathcal{H}}'_B(t') \hat{\mathcal{V}}_B(t', t_0) dt'. \quad (9.5)$$

Соотношение (9.5) представляет собой интегральное уравнение, которое может быть решено по методу последовательных приближений:

$$\hat{\mathcal{V}}_B(t, -\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \hat{\mathcal{H}}'_B(t_1) dt_1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \hat{\mathcal{H}}'_B(t_1) \hat{\mathcal{H}}'_B(t_2) dt_2 + \dots \quad (9.6)$$

Общий член ряда имеет вид

$$\hat{\mathcal{V}}_B^{(n)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} \hat{\mathcal{H}}'_B(t_1) \hat{\mathcal{H}}'_B(t_2) \dots \hat{\mathcal{H}}'_B(t_n) dt_n, \quad (9.7)$$

то есть,

$$\hat{\mathcal{V}}_B(t, -\infty) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} \hat{\mathcal{H}}'_B(t_1) \hat{\mathcal{H}}'_B(t_2) \dots \hat{\mathcal{H}}'_B(t_n) dt_n \quad (9.8)$$

Для того, чтобы упростить запись и получить возможность не следить за порядком выполнения интегрирования, удобно симметризовать формулу (9.8). В случае функции, симметричной относительно своих переменных, можно воспользоваться известной формулой

$$\int_a^b dt_1 \int_a^{t_1} dt_2 \dots \int_a^{t_{n-1}} f(t_1, t_2, \dots, t_n) dt_n =$$

$$= \frac{1}{n!} \int_a^b dt_1 \int_a^b dt_2 \dots \int_a^b f(t_1, t_2, \dots, t_n) dt_n \quad (9.9)$$

Для этого введем хронологический упорядывающий оператор  $\mathfrak{P}$ , который впервые был введен Дайсоном и по определению располагает зависящие от времени операторы в хронологической последовательности, то есть в порядке убывания времени:

$$\mathfrak{P}\{\mathfrak{V}(t_1)\mathfrak{V}(t_2)\dots\mathfrak{V}(t_n)\} = \mathfrak{V}(t_i)\mathfrak{V}(t_j)\dots\mathfrak{V}(t_r), \quad (9.10)$$

$$t_i > t_j > \dots > t_r.$$

Например, для произведения двух операторов можем написать:

$$\mathfrak{P}\{\mathfrak{E}(t_1)\mathfrak{M}(t_2)\} = \begin{cases} \mathfrak{E}(t_1)\mathfrak{M}(t_2) & \text{при } t_1 > t_2, \\ \mathfrak{M}(t_2)\mathfrak{E}(t_1) & \text{при } t_2 > t_1. \end{cases} \quad (9.11)$$

Представлением этого оператора может служить, например, следующее выражение

$$\mathfrak{P} = \frac{1 + \varepsilon(t_1 - t_2)}{2} \mathfrak{E}(t_1)\mathfrak{M}(t_2) + \frac{1 - \varepsilon(t_1 - t_2)}{2} \mathfrak{M}(t_2)\mathfrak{E}(t_1), \quad (9.12)$$

где  $\varepsilon(x)$  - так называемая знаковая функция:

$$\varepsilon(x) = \frac{|x|}{x} = \begin{cases} 1 & \text{при } x > 0, \\ -1 & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (9.13)$$

Применив к подынтегральному выражению (9.8) операцию хронологического упорядочения  $\mathfrak{P}$ , все интегрирования в (9.8) можно проводить по полному интервалу времени от  $t_0 = -\infty$  до  $t$ . При этом, однако, вследствие симметрии интеграла относительно перестановок переменных интегрирования мы получим выражение в  $n!$  раз большее требуемого. В справедливости сказанного нетрудно убедиться на примере двукратного интеграла

$$I_2 = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t \mathfrak{P}\{\mathfrak{V}(t_1)\mathfrak{V}(t_2)\} dt_2. \quad (9.14)$$

Так как

$$\mathfrak{P}\{\mathfrak{V}(t_1)\mathfrak{V}(t_2)\} = \begin{cases} \mathfrak{V}(t_1)\mathfrak{V}(t_2) & \text{при } t_1 > t_2, \\ \mathfrak{V}(t_2)\mathfrak{V}(t_1) & \text{при } t_2 > t_1, \end{cases} \quad (9.15)$$

то область интегрирования  $I_2$  удобно разбить на две области  $t_1 > t_2$  и  $t_2 > t_1$  (рис. 9.1).



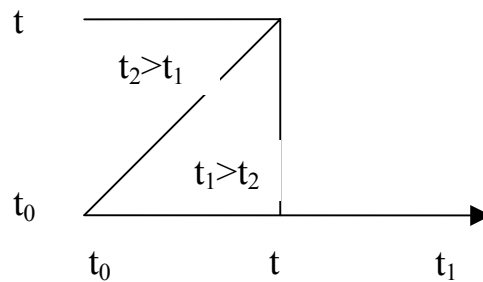


Рис. 9.1.

Тогда

$$I_2 = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{V}(t_1) \mathcal{V}(t_2) dt_2 + \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{V}(t_2) \mathcal{V}(t_1) dt_1. \quad (9.16)$$

Заменяя переменные интегрирования  $t_1 \Leftrightarrow t_2$  во втором слагаемом  $I_2$  и учитывая симметрию подынтегральной функции, получим

$$I_2 = 2! \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{V}(t_1) \mathcal{V}(t_2) dt_2. \quad (9.17)$$

Аналогично можно рассмотреть  $n$ -кратный интеграл, входящий в (9.8).

Таким образом, с помощью хронологического оператора для выражения, входящего в (9.7), можно написать

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} \mathcal{H}'_B(t_1) \mathcal{H}'_B(t_2) \dots \mathcal{H}'_B(t_n) dt_n = \\ & = \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} \mathcal{P} \{ \mathcal{H}'_B(t_1) \mathcal{H}'_B(t_2) \dots \mathcal{H}'_B(t_n) \} dt_n. \end{aligned} \quad (9.18)$$

Поэтому, подставляя (9.18) в (9.8), для  $\mathcal{V}_B(t, -\infty)$  получим

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_B(t, -\infty) &= 1 + \sum_n \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{i}{n!} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \\ & \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} \mathcal{P} \{ \mathcal{H}'_B(t_1) \mathcal{H}'_B(t_2) \dots \mathcal{H}'_B(t_n) \} dt_n = \mathcal{P} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \mathcal{H}'_B(t) dt \right\}. \end{aligned} \quad (9.19)$$

И в соответствии с определением оператора рассеяния  $\mathcal{S}$  (см. Лекцию № 1)

$$\mathfrak{S} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \mathfrak{V}(t, t_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathfrak{V}(t, -\infty) = \mathfrak{F} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \mathfrak{H}'_B(t) dt \right\}. \quad (9.20)$$

Полученная формула (9.20) называется формулой Дайсона. Она позволяет связать оператор рассеяния  $\mathfrak{S}$  (а, следовательно, и его матрицу  $S$ ) с оператором взаимодействия  $\mathfrak{H}'$  (а, следовательно, с энергией взаимодействия), если последнее существует. Формула Дайсона является точной в том смысле, что в ней выполнено суммирование всего ряда теории возмущений.

Можно убедиться, что первые члены разложения общей формулы для оператора  $\mathfrak{S}$  приводят к обычной теории возмущений. Для простоты выкладок ограничимся первым порядком теории возмущений, написав

$$\mathfrak{S} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{H}'_B(t) dt. \quad (9.21)$$

Оператор  $\mathfrak{F}$  в этом случае тождественно равен единице. Беря матричный элемент по состояниям  $a \neq b$ , которые являются собственными функциями (состояниями) гамильтониана  $\mathfrak{H}_0$ , получим

$$\mathfrak{S}_{ba}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathfrak{H}'_B(t))_{ba} dt. \quad (9.22)$$

Используя (8.3), то есть, переходя к представлению Шредингера, получим

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{ba}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle b | \exp \left( \frac{i}{\hbar} \mathfrak{H}_0 t \right) \mathfrak{H}' \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \mathfrak{H}_0 t \right) | a \rangle dt = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle b | \mathfrak{H}' | a \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_b - E_a) t \right] dt = 2\pi i \mathfrak{H}'_{ba} \delta(E_b - E_a). \end{aligned} \quad (9.23)$$

В предпоследнем выражении мы использовали диагональный вид оператора  $\mathfrak{H}_0$  (см. (3.13)) в базисе из его собственных функций, а при получении последнего выражения использовали интеграл Фурье для  $\delta$ -функции (4.36).

Таким образом, из (9.23) мы видим, что  $\mathfrak{S}_{ba}$  в первом приближении теории возмущений совпадает с амплитудой перехода.

Аналогичные, хотя и более громоздкие вычисления, позволяют отождествить  $\mathfrak{S}_{ba}^{(2)}$  с амплитудой перехода во втором порядке теории возмущений.

Несмотря на удобство записи формулы Дайсона, которой часто пользуются в промежуточных выкладках, для фактического вычисления  $S$  - матрицы приходится проводить разложение в ряд и выполнять почленное интегрирование.

Важной особенностью формулы Дайсона является, то, что она легко может быть преобразована к релятивистки инвариантному виду. Поэтому она имеет особенно большое значение при расчете релятивистских эффектов.

## **Тема: Общая теория рассеяния и поглощения частиц.**

### **Лекция № 10**

#### **§10. Амплитуда и сечение рассеяния.**

Рассеяние потока частиц, падающих на рассеивающий центр, принято характеризовать дифференциальным эффективным сечением рассеяния  $d\sigma(\theta, \varphi)$ . Эта величина определяется как отношение числа частиц  $dN_{\text{расс}}$ , рассеянных в единицу времени в телесный угол  $d\Omega$ , к плотности потока  $j_{\text{пад}}$  падающих (налетающих) частиц, то есть дифференциальное эффективное сечение определяется соотношением

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dN_{\text{расс}}(\theta, \varphi)}{j_{\text{пад}}}, \quad (10.1)$$

где углы  $\theta$  и  $\varphi$  задают направление движения рассеянных частиц, причем, ось  $z$  направлена по движению падающих частиц.

$dN_{\text{расс}}$  удобно представить в следующем виде

$$dN_{\text{расс}}(\theta, \varphi) = j_{\text{расс}}(\theta, \varphi) dS, \quad (10.2)$$

где  $j_{\text{расс}}(\theta, \varphi)$  – плотность потока рассеянных частиц на больших расстояниях от рассеивающего центра,  $dS$  - элемент площади перпендикулярный радиус-вектору, проведенному из рассеивающего центра по углами  $\theta$  и  $\varphi$ . Как известно, величина  $dS$  связана с элементом телесного угла  $d\Omega$  следующим соотношением

$$dS = r^2 d\Omega. \quad (10.3)$$

Таким образом, дифференциальное эффективное сечение определено также соотношением

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{j_{\text{расс}}(\theta, \varphi)}{j_{\text{пад}}} dS. \quad (10.4)$$

В квантовой механике под плотностями потоков  $\vec{j}_{\text{пад}}$  и  $\vec{j}_{\text{расс}}(\theta, \varphi)$  подразумеваются соответствующие плотности потоков вероятности. Поэтому, для того, чтобы получить квантово-механическое выражение для дифференциального эффективного сечения, в (10.4) надо поставить соответствующие плотности потоков вероятности.

Рассмотрим, как определяется вектор плотности потока вероятности в квантовой механике. Волновая функция, описывающая движение частицы в общем случае изменяется в пространстве и во времени. Однако можно показать, что это изменение не может быть произвольным. Именно, имеется некоторый закон сохранения. Для формулировки этого закона рассмотрим вероятность нахождения частицы в некотором объеме  $V$ :

$$W_V = \int_V |\Psi|^2 dV. \quad (10.5)$$

Возьмем производную по времени от интеграла (10.5). При этом для преобразований воспользуемся временным уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi$$

и уравнением, сопряженным к нему (ибо именно ему удовлетворяет комплексно-сопряженная волновая функция). Тогда получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \Psi \Psi^* dV &= \int \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) dV = \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \int (\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi) dV = -\frac{\hbar}{2mi} \int \text{div} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) dV \end{aligned} \quad (10.6)$$

Введем вектор  $\vec{j}$ , имеющий смысл плотности потока вероятности

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (10.7)$$

Например, плотность потока вероятности для плоской волны

$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ , в соответствии с (10.7) равна:

$$\vec{j} = \frac{1}{m} \vec{p} |A|^2. \quad (10.8)$$

Придем рассмотрению волновой функции частицы рассеивающейся на силовом центре. Поместим неподвижный рассеивающий центр в начало координат. Направление падающих частиц примем за ось  $z$ . Вдали от рассеивающего центра падающая

частица движется как свободная и ее волновая функция имеет вид плоской волны

$$\psi_{\text{пад}} = e^{ikz}. \quad (10.9)$$

Вблизи силового центра частица испытывает взаимодействие и вид ее волновой функции изменяется. Однако после того, как рассеянная частица уйдет достаточно далеко от центра рассеяния она вновь будет двигаться как свободная. Так как поток рассеянных частиц на большом расстоянии всегда будет направлен от центра рассеяния, то движение рассеянных частиц должно описываться расходящейся волной

$$\psi_{\text{расс}} = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (10.10)$$

где амплитуда расходящейся волны  $f(\theta, \varphi)$ , зависящая вообще говоря от углов  $\theta$  и  $\varphi$ , называется амплитудой рассеяния.

Полную волновую функцию, описывающую движение падающей и рассеянной частиц на больших расстояниях от центра рассеяния можно представить в виде:

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (10.11)$$

Плотность потока вероятности падающей волны (10.9) в соответствии с (10.8) равна

$$j_{\text{пад}} = \frac{p_z}{m} = v_z, \quad (10.13)$$

где  $v_z$  - скорость частицы вдоль оси  $z$ .

Плотность потока вероятности расходящейся волны (10.10) в соответствии с (10.7) равна

$$j_{\text{расс}} = \frac{|f(\theta, \varphi)|^2 v}{r^2}. \quad (10.14)$$

Тогда дифференциальное эффективное сечение рассеяния

$$d\sigma = \frac{j_{\text{расс}}}{j_{\text{пад}}} dS = \frac{j_{\text{расс}}}{j_{\text{пад}}} r^2 d\Omega = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega, \quad (10.15)$$

где  $d\Omega$  - телесный угол.

Таким образом, эффективное сечение рассеяния определяется величиной амплитуды рассеяния.

Вычисление амплитуды рассеяния производится обычно следующим образом. Находится решение уравнения Шредингера для движения частицы в поле рассеивающего центра, затем ищется асимптотический вид решения на больших расстояниях от центра рассеяния, которое имеет вид (10.10). Тогда коэффициент при

расходящейся сферической волне  $\frac{e^{ikr}}{r}$  дает искомую амплитуду рассеяния.

Представление волновой функции, описывающей движение частицы вдали от рассеивающего центра в виде (10.10), то есть в виде суммы падающей и расходящейся волн, было произведено на основании физических соображений.

Можно, однако, строго показать, что вдали от неподвижного рассеивающего центра, потенциал которого  $U(\vec{r})$ , асимптотическое решение уравнения Шредингера может иметь вид (10.10). Для этого запишем стационарное уравнение Шредингера в виде

$$(\Delta + k^2)\psi = \frac{2mU}{\hbar^2}\psi, \quad (10.16)$$

где  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , а  $m$  и  $E$  – масса и энергия частицы. С помощью функции Грина решение можно записать в виде

$$\psi = \psi_0 + \int G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{2m}{\hbar^2} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') dV', \quad (10.17)$$

где функция  $\psi_0$  удовлетворяет уравнению

$$(\Delta + k^2)\psi_0 = 0. \quad (10.18)$$

Решение (10.18)  $\psi_0 = e^{ikz}$  имеет вид плоской волны. Функция Грина удовлетворяет уравнению

$$(\Delta + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (10.19)$$

Такие уравнения часто встречаются в классической электродинамике и их решения хорошо известны, поэтому решение (10.19) задается в виде интеграла Даламбера:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\delta(\vec{r}'' - \vec{r}') e^{ik|\vec{r} - \vec{r}''|} dV''}{|\vec{r} - \vec{r}''|}. \quad (10.20)$$

Выполняя интегрирование по  $dV''$ , получим

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (10.21)$$

Подставляя в (10.17) выражения (10.18) и (10.21), получаем интегральное уравнение

$$\psi = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') dV'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (10.22)$$

Рассмотрим далее интеграл, входящий в (10.22), и определим его значения на больших расстояниях от центра рассеяния  $|\vec{r}|$ . Определим большие расстояния следующим образом. Пусть область значений  $\vec{r}'$ , в которой подинтегральная функция заметно отлична от нуля и в которой подинтегральная функция дает основной вклад в значение интеграла, имеет размеры  $\sim R$ . Расстояния  $|\vec{r}|$ , для которых выполняется неравенство  $|\vec{r}| \gg R$ , будем называть большими. Отметим, что такие расстояния всегда существуют при достаточно быстром убывании  $U(\vec{r})$ .

При вычислении интеграла (10.22) на больших расстояниях можно полагать, что  $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$ . Поэтому, разлагая  $|\vec{r} - \vec{r}'|$  в ряд, получим

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}')^2} \approx \sqrt{r^2 - 2\vec{r}\vec{r}'} = r - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r}. \quad (10.23)$$

Подставляя это разложение в (10.22), находим

$$\psi = e^{ikz} - \frac{m e^{ikr}}{2\pi\hbar^2 r} \int U(\vec{r}') e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \psi(\vec{r}') dV', \quad (10.24)$$

где  $\vec{k} = \frac{k\vec{r}}{r}$ .

Волновой вектор  $\vec{k}$  направлен по радиус-вектору и задает направление распространения расходящейся сферической (шаровой) волны.

Сравнение выражений (10.10) и (10.24), убеждает нас в том, что вид выражения (10.10) имеет общий характер.

Из (10.24) следует также, что амплитуда рассеяния равна

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') e^{-i\vec{k}\vec{r}'} dV'. \quad (10.25)$$

## Лекция № 11

### §11. Ряд последовательных приближений Борна и формула Борна.

Хотя в предыдущей лекции мы нашли асимптотическое выражение волновой функции (10.24) и выражение для амплитуды рассеяния (10.25), задача о получении конкретного вида амплитуды рассеяния еще далека от решения. Действительно, амплитуда рассеяния согласно (10.25) выражается через неизвестную волновую функцию

$\psi$ . Точное решение уравнения Шредингера и нахождение  $f(\theta, \varphi)$  в большинстве практически важных задач сопряжено с огромными математическими сложностями. Поэтому широко используются приближенные методы расчета. Важнейшим из них является метод Борна. В основе этого метода лежит предположение о том, что потенциальная энергия взаимодействия рассеянной частицы с центром сил мала, так что ее можно рассматривать как слабое возмущение. Если потенциальная энергия является малым возмущением, то можно считать, что первоначальное движение частицы сравнительно мало изменяется. При этом интегральное уравнение (10.24) может быть решено по методу последовательных приближений.

В нулевом приближении малый член, содержащий потенциальную энергию, может быть опущен. Тогда

$$\psi_0 = e^{ikz} = e^{i\vec{k}_0 \vec{r}}, \quad (11.1)$$

где  $\vec{k}_0 = k \vec{n}_0$ ,  $\vec{n}_0$  - орт вдоль оси  $z$ .

В первом приближении вместо волновой функции в правой части (10.24) должно быть подставлено ее нулевое приближение (11.1). Тогда получаем

$$\psi = e^{ikz} - \frac{m e^{i\vec{k}_0 \vec{r}}}{2\pi \hbar^2} \int U(\vec{r}') e^{i\vec{k} z' - i\vec{k}_0 \vec{r}'} dV'. \quad (11.2)$$

В этом приближении амплитуда рассеяния равна

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int U(\vec{r}') e^{-i\vec{K} \vec{r}'} dV'. \quad (11.3)$$

При этом мы ввели обозначение

$$\vec{K} = \vec{k}_0 - \vec{k}, \quad (11.4)$$

где модуль

$$K = k |\vec{n}_0 - \vec{n}| = 2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2mv}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2}. \quad (11.5)$$

Вектор  $\vec{K}$  часто называется вектором столкновений, соответственно вектор  $\vec{p} = \hbar \vec{K}$  носит название вектора передачи импульса.

Если потенциальная энергия не зависит от углов  $U = U(|\vec{r}'|)$ , то в (11.3) можно выполнить интегрирование по углам:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int_0^\infty U(|\vec{r}'|) r'^2 dr' \int_0^\pi e^{-iK r' \cos \vartheta} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(|\vec{r}'|) \frac{\sin K r'}{K r'} r'^2 dr'. \end{aligned} \quad (11.6)$$

Таким образом, в первом приближении амплитуда рассеяния определяется потенциальной энергией в первой степени. И тогда для дифференциального сечения получим

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int U(|\vec{r}'|) e^{i\vec{k}\vec{r}'} dV' \right|^2 d\Omega =$$

$$= -\frac{4m^2}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty U(|\vec{r}'|) \frac{\sin Kr'}{Kr'} r'^2 dr' \right|^2 d\Omega. \quad (11.7)$$

Выражение (11.7) носит название формулы Борна.

Продолжая последовательные приближения, то есть, подставляя в (10.24) волновую функцию из (11.2) можно найти волновую функцию и амплитуду рассеяния во втором приближении. Добавка к амплитуде рассеяния во втором приближении определялась бы интегралом от квадрата потенциальной энергии взаимодействия. Аналогично могут быть найдены поправки следующих порядков (ряд последовательных приближений Борна).

Отметим, что при малых углах рассеяния  $\theta$  из (11.7) получим

$$d\sigma = -\frac{4m^2}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty U(|\vec{r}'|) r'^2 dr' \right|^2 d\Omega. \quad (11.7)$$

Таким образом, в этом случае сечение оказывается не зависящим от скорости частицы.

Обсудим условия применимости формулы Борна. Для быстрой сходимости ряда последовательных приближений надо, чтобы поправка к волновой функции первого приближения  $\psi_1$  была мала по сравнению с волновой функцией нулевого приближения  $\psi_0$ , то есть выполнялось условие

$$|\psi_1| \ll |\psi_0|. \quad (11.8)$$

С помощью выражения (10.22) можно найти выражение для  $\psi_1$ , справедливое при произвольных значениях  $\vec{r}$  и тогда (11.8) запишется в виде:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int \frac{e^{ikz'} e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') dV' \right| \ll 1. \quad (11.9)$$

Поскольку  $\psi_1(\vec{r})$  убывает с увеличением расстояния от рассеивающего центра, то условие (11.9) будет выполнено, если оно выполняется в начале координат. Поэтому условие (11.9) можно заменить неравенством

$$|\psi_1(0)| = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int \frac{e^{ik(z'+r')} U(r') dV'}{r'} \right| \ll 1. \quad (11.10)$$

Дальнейшие оценки интеграла можно произвести в двух предельных случаях:

1. При выполнении соотношений  $kR \ll 1$ , где  $R$  – эффективный радиус взаимодействия. Это соответствует малым энергиям частиц

$$E \ll \frac{\hbar^2}{mR^2} \quad (11.11)$$

$$(k \ll \frac{1}{R}, k^2 \ll \frac{1}{R^2}, k^2 \ll \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E \ll \frac{\hbar^2}{mR^2}).$$

2. При выполнении обратного неравенства  $kR \gg 1$ , что соответствует условию

$$E \gg \frac{\hbar^2}{mR^2}. \quad (11.12)$$

В первом случае при оценке интеграла можно положить в (11.10)

$$e^{ik(r'+z')} \approx 1.$$

Тогда (11.10) дает по порядку величины

$$\frac{m}{\hbar^2} \int \frac{|U(r')| dV'}{r'} \approx \frac{m}{\hbar^2} |U_0| R^2 \ll 1, \quad (11.13)$$

где  $U_0$  – некоторое среднее значение энергии взаимодействия в области  $R$ .

Запишем соотношение (11.13) в виде

$$U_0 / \left( \frac{\hbar^2}{mR^2} \right) \ll 1. \quad (11.14)$$

$\frac{\hbar^2}{mR^2}$  по порядку величины равно минимальной глубине потенциальной ямы радиуса  $R$ , при которой возникает связанный уровень ( $U_{0 \min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$ ).

Мы видим, что условия применимости формулы Борна для рассеяния медленных частиц имеет простой смысл. Именно, средняя энергия взаимодействия должна быть мала по сравнению с минимальной потенциальной энергией частицы в яме, при которой образуется связанное состояние.

В случае большой энергии частицы область применимости формулы Борна значительно расширяется. Экспоненциальный множитель в формуле (11.10) в этом случае очень быстро осциллирует, что приводит к уменьшению общего значения

интеграла. При вычислении интеграла можно вынести медленно изменяющиеся множители за знак интеграла, написав

$$\begin{aligned} |\psi_1(0)| &\approx \frac{m}{2\pi\hbar^2} |U_0| \left| \int \frac{e^{ik(z'+r')}}{r'} dV' \right| = \\ &= \frac{m|U_0|}{\hbar^2} \left| \int_0^R \int_0^\pi e^{ikr'(1+\cos\theta)} \sin\theta d\theta r' dr' \right| = \frac{m|U_0|}{\hbar^2 k} \left| \int_0^R (1 - e^{2ikr'}) dr' \right| \approx \\ &\approx \frac{m|U_0|R}{\hbar^2 k} \ll 1. \end{aligned}$$

При этом мы опустили интеграл от быстро осциллирующей величины  $e^{2ikr'}$ , как малой по сравнению с оставленным.

Перепишав последнее неравенство в виде

$$\frac{|U_0|R}{\hbar v} \ll 1, \quad (11.15)$$

мы видим, что формула Борна справедлива для частиц, имеющих тем более высокую энергию, чем больше произведение  $|U_0|R$ , определяющееся свойствами рассеивающего центра.

В важном случае кулоновского потенциала потенциал  $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  спадает так медленно, что нельзя ввести понятие об эффективном размере области взаимодействия  $R$ , однако при  $U_0 = \frac{Ze^2}{R}$  входящее в (11.15) произведение  $|U_0|R$  от  $R$  не зависит.

Поэтому в кулоновском поле (11.15) приобретает вид

$$\frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1. \quad (11.16)$$

Неравенство (11.16) имеет наглядный смысл: если ввести скорость электрона на первой Боровской орбите водородоподобного атома с зарядом ядра  $Ze$

$$v_R = \frac{Ze^2}{\hbar}, \quad \text{то неравенство (11.16) примет}$$

вид

$$\frac{v_R}{v} \ll 1, \quad (11.17)$$

то есть скорость частицы должна быть велика по сравнению со скоростью электрона на первой Боровской орбите.

Неравенство (11.16) требует для применимости формулы Борна тем больших энергий, чем больше заряд рассеивающего ядра.

## Лекция № 12

### §12. Рассеяние заряженных частиц атомами.

Применим формулу Борна к вычислению эффективного сечения рассеяния быстрых заряженных частиц атомами.

Будем считать, что ядро атома с зарядом  $Ze$  находится в начале координат, заряд атомной оболочки распределен в пространстве с плотностью  $n(\vec{r})$ . Размерами ядра будем пренебрегать и считать его точечным. Дифференц. эффективное сечение рассеяния дается формулой Борна (11.7), которое при  $U(\vec{r}) = e\phi(\vec{r})$ , где  $e$  – заряд,  $\phi(\vec{r})$  – потенциал электрического поля, действующего на рассеивающуюся частицу, принимает вид

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{m^2 e^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int \phi(\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} dV' \right|^2 d\Omega. \quad (12.1)$$

Интеграл в (12.1) удобно выразить через распределение плотности заряда в атоме. Для этого заметим, что  $\int \phi(\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} dV'$  представляет собой компоненту Фурье от потенциала. Она может быть выражена, через компоненту Фурье от плотности заряда. Тогда получаем

$$d\sigma = \frac{4m^2 e^2}{\pi^4 K^4} \left| \int \rho(\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} dV' \right|^2 d\Omega. \quad (12.2)$$

Плотность заряда в атоме можно записать в виде

$$\rho(\vec{r}) = Ze\delta(\vec{r}) - en(\vec{r}). \quad (12.3)$$

Тогда для дифференц. сечения получаем окончательно:

$$\begin{aligned} d\sigma &= \frac{4m^2 e^4}{\pi^4 K^4} \left| \int Ze^{i\vec{k}\vec{r}'} dV' - \int n(\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} dV' \right|^2 d\Omega = \\ &= \frac{4m^2 e^4}{\pi^4 K^4} |Z - F(K)|^2 d\Omega, \end{aligned} \quad (12.4)$$

где

$$F(K) = \int n(\vec{r}') e^{i\vec{k}\vec{r}'} dV'. \quad (12.5)$$

Величина  $F(K)$  называется атомным формфактором. Ее значение определяется распределением плотности электронного заряда. Подставляя в (12.5) значение модуля вектора столкновения из (11.5)

$K = \frac{2mv}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2}$ , перепишем дифференц. эффективное сечение в форме

$$d\sigma = \left( \frac{e^2}{2m v^2} \right)^2 |Z - F(K)|^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (12.6)$$

Рассмотрим вначале частный случай формулы (12.6). Если рассеяние происходит на точечном ядре, лишенном электронной оболочки, то есть  $n(\vec{r}) = 0$ , то, следовательно,  $F(K) = 0$ . Тогда получаем для дифференциального эффективного сечения:

$$d\sigma = \left( \frac{Z e^2}{2m v^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (12.7)$$

Таким образом мы получаем формулу Резерфорда, которая может быть получена и в классической механике. В данном случае формула Резерфорда получена с помощью приближенного метода Борна. Отметим, что, как показали Н. Мотт и Г. Месси (кн. Теория атомных столкновений), при точном решении задачи получается тоже выражение. Так как эффективное сечение рассеяния при точном решении не содержит постоянную Планка  $\hbar$ , то результаты, даваемые классической и квантовой физикой, естественно, должны совпадать.

Обращение дифференциального эффективного сечения (12.7) в бесконечность при рассеянии на бесконечно малые углы связано с медленным изменением кулоновского потенциала. Поэтому частицы рассеиваются, как бы далеко они не пролетали от центра рассеяния. В действительности, однако, экранирующее действие электронной оболочки обеспечивает, как будет показано ниже, конечное значение сечения рассеяния.

Рассмотрим теперь атомный формфактор (12.5). Эффективная область интегрирования в нем имеет размер порядка размера атома  $a$ . Вне этой области  $n(\vec{r})$  обращается в нуль. Поэтому при малых углах  $\theta$ , при которых  $K a \ll 1$ , в интеграле формфактора (12.5) можно разложить экспоненту в ряд. Тогда получим

$$Z - F(K) = Z - Z - i \vec{K} \int n(\vec{r}') \vec{r}' dV' + \frac{1}{2} \int n(\vec{r}') (\vec{K} \vec{r}')^2 dV'. \quad (12.8)$$

В формуле (12.8) два первых члена взаимно сокращаются, так как заряд электронной оболочки атома равен заряду ядра. Третий член представляет собой дипольный момент атома, который, как

известно, равен нулю. Интегрируя в последнем члене по углам, получим

$$Z - F(K) = \frac{2\pi K^2}{3} \int_0^{\infty} n(|\vec{r}|) r^4 dr. \quad (12.9)$$

Дифференциальное эффективное сечение в предельном случае будет иметь вид  $Ka \ll 1$  будет иметь вид

$$d\sigma = \left( \frac{4\pi m e^2}{3\hbar} \right)^2 \left| \int n(r) r^4 dr \right|^2 d\Omega. \quad (12.10)$$

Таким образом, из-за экранирования заряда ядра электронной оболочкой дифференциальное эффективное сечение при малых углах рассеяния оказывается конечной и постоянной (не зависящей от углов) величиной.

Наоборот, при больших углах рассеяния, когда удовлетворяется обратное неравенство  $Ka \gg 1$ , экспонента в (12.5) начинает быстро осциллировать и формфактор оказывается малой величиной. Пренебрегая им по сравнению с  $Z$ , мы опять приходим к формуле Резерфорда (12.7). Следовательно, экранирование заряда ядра не проявляется при больших углах рассеяния.

В качестве примера вычислим формфактор для атома водорода. Плотность заряда в атоме водорода в основном состоянии равна

$$n(r) = |\psi(r)|^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-\frac{2r}{a}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{m e^2}. \quad (12.11)$$

Следовательно, формфактор определяется интегралом

$$F(K) = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-\frac{2r}{a}} e^{i\vec{K}\vec{r}} r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (12.12)$$

Направив ось  $Z$  вдоль вектора  $\vec{K}$ , получим

$$F(K) = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-\frac{2r}{a}} e^{iKr \cos\theta} r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (12.13)$$

Произведя интегрирование, окончательно найдем

$$F(K) = \frac{16}{(4 + K^2 a^2)^2}. \quad (12.14)$$

При этом дифференциальное эффективное сечение для атома водорода может быть написано в виде

$$d\sigma = \left( \frac{e^2}{2m v^2} \right)^2 \left[ 1 - \frac{16}{(4 + K^2 a^2)^2} \right]^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (12.15)$$

Полное сечение получается интегрированием по всем значениям угла рассеяния.

Для других атомов плотность заряда и потенциал взаимодействия рассеиваемой частицы с атомом могут быть вычислены с помощью приближенных методов Хартри или Хартри-Фока. После этого можно производить расчет формфактора соответствующего атома согласно формуле (12.5).

## Лекция № 13

### §13. Фазовая теория рассеяния.

В предыдущих лекциях мы рассмотрели приближенный метод теории рассеяния метод Борна. Наряду с приближенной теорией оказывается возможным развить точную теорию рассеяния, именуемую фазовой теорией. В точной теории рассеяния не делается никаких упрощающих предположений относительно характера взаимодействия частиц с рассеивающим центром. Поэтому эта теория применима при любых энергиях рассеивающихся частиц. Однако, как мы увидим ниже, в точной теории эффективное сечение выражается в виде бесконечных рядов, не всегда пригодных для практического применения.

Однако схема фазовой теории рассеяния не отличается от ранее принятой. Рассмотрим движение частицы в поле рассеивающего центра. Будем считать рассеивающее поле сферически симметричным и предположим, что вдали от центра падающая частица описывается плоской волной  $e^{ikz}$ , а рассеянная описывается расходящейся шаровой (сферической) волной. Пусть найдено общее решение уравнения Шредингера в поле с центральной симметрией. Вдали от рассеивающего центра найденное решение следует представить в виде (10.11), то есть в виде падающей плоской и расходящейся шаровой волны. Амплитуда последней, как мы знаем, определяет интересующее нас эффективное сечение рассеяния.

Еще раз рассмотрим общее решение уравнения Шредингера в поле с центральной симметрией (см. курс лекций «Теория атомного ядра»).

Уравнение Шредингера для стационарных состояний частицы, движущейся в силовом поле с потенциальной энергией  $U(r)$ , имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi = 0. \quad (13.1)$$

В случае потенциального поля с центральной симметрией уравнение Шредингера удобно преобразовать к сферическим координатам, поскольку потенциальная энергия зависит только от расстояния до начала координат  $r$ . Выражая оператор Лапласа в сферических координатах, имеем

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi} \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)]\psi = 0. \quad (13.2)$$

Это уравнение удобно преобразовать, введя в него явным образом оператор квадрата момента

$$\mathfrak{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi},$$

где  $\Delta_{\vartheta, \varphi}$  - угловая часть оператора Лапласа, взятого в сферической системе координат.

Тогда окончательно получаем

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\mathfrak{L}^2}{\hbar^2 r^2} \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)]\psi = 0. \quad (13.3)$$

Поскольку при движении в поле с центральной симметрией сохраняются три величины – энергия, квадрат момента  $\vec{l}^2$  и проекция момента на произвольную ось  $l_z$ , то обычно рассматриваются состояния с заданными значениями этих трех величин.

Собственные значения операторов  $\mathfrak{L}^2$  и  $\mathfrak{L}_z$  характеризуются азимутальным и магнитным квантовыми числами  $\ell$  и  $m$ , а собственными функциями этих операторов служат сферические функции  $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$  с индексами  $\ell$  и  $m$ :

$$\mathfrak{L}^2 Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi), \quad (13.4)$$

$$\mathfrak{L}_z Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi). \quad (13.5)$$

Уравнение (13.3) допускает разделение угловых и пространственных переменных. Угловая часть (13.3) совпадает с уравнением (13.4) и она описывает движение с заданными значениями  $\ell$  и  $m$ . Поэтому решение уравнения (13.3) ищется в виде

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi). \quad (13.6)$$

Подставляя выражение (13.6) в уравнение (13.3) и учитывая (13.4), мы получим следующее уравнение для радиальной части волновой функции  $R(r)$ :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E - U(r) - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \right] R(r) = 0. \quad (13.7)$$

Мы видим, что выражение для радиальной составляющей  $R(r)$  волновой функции  $\psi$  зависит от вида потенциальной энергии  $U(r)$ . В то же время угловая часть  $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$  волновой функции определяется не зависит от вида потенциальной энергии  $U(r)$  и определяется лишь величиной момента количества движения частицы (квантовое число  $\ell$ ) и его проекцией на ось  $Z$  (квантовое число  $m$ ).

Рассмотрим более детально уравнение (13.7) для радиальной части волновой функции  $R(r)$ . Прежде всего из него следует, что возможные значения энергии частицы, то есть такие значения энергии для которых существуют решения уравнения (13.7) для радиальной части волновой функции, не должны зависеть от проекции момента количества движения на ось  $Z$ . Это связано с тем, что в сферически-симметричном поле все направления являются равноправными (изотропия пространства). Таким образом, изотропия пространства приводит к вырождению энергетических уровней системы, энергия которых не зависит от квантового числа  $m$ . Отметим, что, как известно, вырождение всегда обусловлено определенными свойствами симметрии рассматриваемой системы.

Вместо функции  $R(r)$  удобно следующим образом ввести функцию  $\chi(r)$ :

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}. \quad (13.8)$$

Для  $\chi(r)$  из (13.7) получаем следующее уравнение:

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E - U(r) - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \right] \chi(r) = 0. \quad (13.9)$$

Напомним, что волновая функция во всей области ее определения должна удовлетворять стандартным условиям: быть однозначной, непрерывной и конечной. Условие конечности волновой функции при  $r = 0$  приводит к требованию

$$\chi(0) = 0. \quad (13.10)$$

Таким образом, уравнение для радиальной составляющей  $R(r)$  волновой функции (13.7) свелось к уравнению одномерного движения (13.9) с эффективной потенциальной энергией, равной

$$U_{\text{эфф}}(r) = E - U(r) - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}. \quad (13.11)$$

Отметим, что, как и в классической механике, величина  $\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}$  часто именуется центробежной энергией.

Не конкретизируя детального вида потенциальной энергии  $U(r)$ , можно, тем не менее, сделать определенные заключения о поведении волновой функции вблизи начала координат и на очень больших расстояниях от силового центра.

Исследуем сначала область малых расстояний  $r \rightarrow 0$ . Будем считать, что вблизи начала координат потенциальная энергия взаимодействия  $U(r)$  изменяется достаточно медленно, так что выполняется условие

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 U(r) = 0. \quad (13.12)$$

Это условие означает, что  $|U(r)|$  при  $r \rightarrow 0$  растет медленнее, чем  $1/r^2$ . Оно выполнено, в частности, для электрона, находящегося в кулоновском поле ядра. При этом в уравнении (13.9) при  $r \rightarrow 0$  можно пренебречь членами  $E\chi$  и  $U(r)\chi$  по сравнению с членом  $\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \chi$ . Тогда получим

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \chi(r) = 0. \quad (13.13)$$

Решение последнего уравнения ищем в виде

$$\chi(r) = A r^\gamma. \quad (13.14)$$

Подставляя (13.14) в (13.13) получим уравнение

$$\gamma(\gamma + 1) = \ell(\ell + 1). \quad (13.15)$$

Уравнение (13.15) имеет два корня:

$$\gamma_1 = \ell + 1; \quad \gamma_2 = -1.$$

Второй корень мы должны отбросить, так как ему отвечает функция  $U(r)$ , которая неограниченно возрастает при  $r \rightarrow 0$ . Таким образом, окончательно получаем, что на малых расстояниях  $\chi(r) \sim r^{\ell+1}$ , а радиальная часть волновой функции выражается формулой

$$R(r) = A r^\ell. \quad (13.16)$$

Вероятность обнаружить частицу на данном расстоянии  $r$  от центра независимо от углов  $\vartheta$  и  $\varphi$  дается квадратом модуля радиальной функции, то есть величиной  $|R(r)|^2 r^2 dr$ .

Из (13.16) следует, что при малых  $r$  эта вероятность пропорциональна  $r^{2\ell+2} dr$  и тем меньше, чем больше  $\ell$ . Центробежная сила как бы отбрасывает частицу от центра.

Исследуем далее асимптотическое поведение волновой функции на больших расстояниях от начала координат. На больших расстояниях сила, действующая на частицу, стремится к нулю и, следовательно, потенциальная энергия  $U(r)$  – к некоторой постоянной. Всюду, где это не оговорено особо, мы будем выбирать, эту постоянную за начало отсчета потенциальной энергии, то есть считать, что

$$\lim_{r \rightarrow \infty} U(r) = 0. \quad (13.17)$$

Тогда в уравнении (13.9) при больших  $r$  можно пренебречь слагаемыми  $U(r)\chi$  и  $\frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} \chi$  по сравнению с членом  $E\chi$ . При этом уравнение (13.9) приобретает вид

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + k^2 \chi(r) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}. \quad (13.18)$$

Решение последнего уравнения можно, очевидно, написать как

$$\chi(r) = A_1 e^{ikr} + A_2 e^{-ikr}, \quad (13.19)$$

где  $A_1$  и  $A_2$  - постоянные интегрирования.

Рассмотрим, прежде всего, решения, отвечающие положительным значениям энергии. При  $E > 0$  величина  $k$ , определяемая формулой (13.18), имеет вещественное значение. Радиальная часть волновой функции тогда имеет вид

$$R(r) = A_1 \frac{e^{ikr}}{r} + A_2 \frac{e^{-ikr}}{r}. \quad (13.20)$$

Так как оба слагаемых ограничены по модулю, то ни одна из постоянных  $A_1$  и  $A_2$  не должна быть равной нулю. Вдали от центра радиальная функция представляет собой суперпозицию сходящейся и расходящейся сферических волн.

Определенное заключение может быть сделано и относительно энергетического спектра частицы при произвольном виде энергии взаимодействия  $U(r)$ . Действительно, функция (13.19) не обращается в нуль при  $r \rightarrow \infty$ , что отвечает инфинитному движению, то есть движению, при котором частица или система уходит на бесконечность. Интеграл от квадрата модуля функции (13.20), взятый по всему пространству, расходится. Но, как мы знаем из квантовой механике такие волновые функции являются обобщенными волновыми функциями и они соответствуют сплошному (непрерывному) спектру. Следовательно, при  $E > 0$  энергетический спектр является сплошным.

Если радиальная составляющая плотности потока вероятности равна нулю, то функция (13.20) должна быть вещественной. В этом случае полагаем:

$$A_1 = \frac{1}{2i} A' e^{i\alpha}, \quad A_2 = -\frac{1}{2i} A' e^{-i\alpha}, \quad (13.21)$$

причем  $A'$  и  $\alpha$  уже – действительны.

Тогда в соответствии с (13.20) радиальная функция равна

$$R(r) = A' \frac{\sin(kr + \alpha)}{r}, \quad (13.22)$$

где начальная фаза  $\alpha$  зависит от  $k$  и  $\ell$ , а также от конкретного вида функции  $U(r)$ . Немного позже, мы рассмотрим свободное

движение частицы с заданным моментом количества движения и покажем, что в этом случае ( $U(r) = 0, \ell \neq 0$ )  $\alpha = -\frac{\ell \pi}{2}$ . В соответствии с этим полагаем

$$\alpha = -\frac{\ell \pi}{2} + \delta_\ell, \quad (13.23)$$

где фазы  $\delta_\ell$  непосредственно связаны с действием силового поля ( $U(r) \neq 0$ ) на частицу и обращаются в нуль для свободнодвижущейся частицы.

Рассмотрим теперь область отрицательных энергий  $E < 0$ . Поскольку кинетическая энергия частицы всегда положительна, полная энергия может быть отрицательной только в случае притяжения частицы к центру. Если  $E < 0$ , то величина  $k$  имеет чисто мнимые значения, то есть

$$k = i\kappa, \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}. \quad (13.24)$$

Радиальная функция (13.20) тогда запишется в виде

$$R(r) = A_1 \frac{e^{-\kappa r}}{r} + A_2 \frac{e^{\kappa r}}{r}. \quad (13.25)$$

Чтобы удовлетворить требованию конечности волновой функции при  $r \rightarrow \infty$ , мы должны положить постоянную  $A_2$  равной нулю и тогда

$$R(r) = A_1 \frac{e^{-\kappa r}}{r}. \quad (13.26)$$

В этом случае радиальная волновая функция (13.26) стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$ . Это означает, что вероятность нахождения частицы на большом расстоянии от центра сил равна нулю. Следовательно, движение частицы является финитным. Мы видим, что имеется сходство между выводами квантовой механики и классической механики: при положительной полной энергии ( $E > U(\infty)$ ) частицы уходят на бесконечность, при отрицательной – совершают финитное движение.

Рассмотрим теперь вопрос о спектре энергий при  $E < 0$ . Как мы показали, этим энергиям отвечает финитное движение и соответствующие волновые функции (13.26) квадратично интегрируемы. Такие волновые функции, как известно из

квантовой механики, принадлежат дискретному спектру. Следовательно, при  $E < 0$  энергетический спектр дискретен.

Общее решение уравнения Шредингера (13.2) можно представить в виде суперпозиции волновых функций (13.6)

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{\ell, m} B_{\ell m} R_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi). \quad (13.27)$$

Для решения, не зависящего от угла  $\varphi$ , мы получим более простое выражение (суперпозиция состояний с  $m = 0$ )

$$\psi(r, \vartheta) = \sum_{\ell} c_{\ell} R_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \vartheta), \quad (13.28)$$

где  $P_{\ell}(\cos \vartheta)$  - полиноми Лежандра.

## Лекция № 14

### §14. Фазовая теория рассеяния (продолжение).

Рассмотрим свободное движение частицы с заданным моментом количества движения. До сих пор мы представляли свободно движущуюся частицу плоской волной  $e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$ , где  $\vec{k}$  - волновой вектор частицы  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ ,  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ . Эта волновая функция описывает стационарное состояние с определенным значением импульса и энергии  $E = \frac{p^2}{2m}$  частицы. Для дальнейшего нам следует

найти волновые функции таких стационарных состояний свободно движущейся частицы, в которых, помимо определенного значения энергии  $E$ , заданы также величина ее момента количества движения и проекции момента на ось  $Z$ . В классической механике свободная частица, движущаяся с определенным импульсом, автоматически обладает и определенным моментом количества движения. В квантовой механике положение существенно меняется. В состоянии с заданным импульсом момент количества движения является неопределенной величиной. С другой стороны, в состоянии с заданным моментом количества движения и его проекцией на ось  $Z$  направление импульса также неопределенно. Это связано с тем, что соответствующие величины одновременно не могут иметь определенных значений. Для того чтобы найти нужную нам волновую функцию, рассмотрим движение свободной частицы в

сферических координатах и положим в уравнении Шредингера (13.3)  $U(r) = 0$ , имеем

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\ell^2}{2\mu r^2} \psi = E \psi. \quad (14.1)$$

Будем искать волновую функцию свободной частицы в виде

$$\psi_{k\ell m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{k\ell}(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi). \quad (14.2)$$

При этом радиальная часть  $R_{k\ell}(r)$  должна удовлетворять уравнению (13.7), в котором также следует положить  $U(r) = 0$ , то есть следующему уравнению

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R_{k\ell}(r)}{\partial r} \right) + \left[ k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{k\ell}(r) = 0. \quad (14.3)$$

Здесь мы выразили энергию  $E$  через волновое число  $k$ .

При  $\ell = 0$  уравнение переписется в виде

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R_{k\ell=0}(r)}{\partial r} \right) + k^2 R_{k\ell=0}(r) = 0. \quad (14.4)$$

Решением последнего уравнения, не обращающимся в бесконечность в начале координат, служит функция

$$R_{k0} = A \frac{\sin kr}{r}. \quad (14.5)$$

Для нахождения решения уравнения (14.3) при  $\ell \neq 0$  введем новую функцию по формуле

$$R_{k\ell} = \frac{Z}{\sqrt{s}}, \quad (14.6)$$

где  $s = kr$ . При такой замене уравнение (14.3) преобразуется к виду

$$\frac{d^2 Z}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{dZ}{ds} + \left( 1 - \frac{\left( \ell + \frac{1}{2} \right)^2}{s^2} \right) Z = 0. \quad (14.7)$$

Решением (14.7), удовлетворяющим условию конечности волновой функции в начале координат, является функция Бесселя полуцелого порядка

$$Z(s) = C J_{\ell + \frac{1}{2}}(s). \quad (14.8)$$

Соответственно для радиальной функции имеем

$$Z(s) = C \frac{J_{\ell + \frac{1}{2}}(k r)}{\sqrt{k r}}. \quad (14.9)$$

Вдали от начала координат ( $r \rightarrow \infty$ ) можно воспользоваться известным асимптотическим выражением для функции Бесселя и получить асимптотическое решение  $R_{k\ell}(r)$

$$R_{k\ell}(r) = C \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right)}{k r}. \quad (14.10)$$

Постоянная  $C$  определяется условием нормировки. На малых расстояниях от силового центра ( $r \rightarrow 0$ ) радиальная функция (14.9) принимает вид

$$R_{k\ell}(r) \sim r^\ell \quad (14.11)$$

в соответствии с общим выражением (13.16).

## Лекция № 15

### §15. Фазовая теория рассеяния (продолжение).

Согласно (13.28) общее решение уравнения Шредингера в поле с центральной симметрией, не зависящее от угла  $\vartheta$  может быть представлено следующим разложением

$$\psi(r, \vartheta) = \sum_{\ell} A_{\ell} R_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \vartheta), \quad (15.1)$$

Каждый из членов ряда (15.1) будем именовать  $\ell$  - й парциальной волной. Вдали от центра сил асимптотический вид радиальных функций  $R_{\ell}$  дается формулами (13.21) – (13.23):

$$R_{\ell}(r) = B_{\ell} \frac{\sin\left(kr + \delta_{\ell} - \frac{\pi\ell}{2}\right)}{kr} = B_{\ell} \frac{e^{i\left(kr + \delta_{\ell} - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr + \delta_{\ell} - \frac{\pi\ell}{2}\right)}}{2ikr}. \quad (15.2)$$

2)

Напомним (см. лекц. 13), что если потенциальная энергия  $U(r) = 0$ , то совокупность фаз  $\delta_{\ell}$  также обращается в нуль. Нужно нам асимптотическое выражение для волновой функции частицы, следовательно, может быть представлено в следующем виде

$$\psi = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell} P_{\ell}(\cos \vartheta) \frac{e^{i\left(kr + \delta_{\ell} - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr + \delta_{\ell} - \frac{\pi\ell}{2}\right)}}{2ikr}. \quad (15.3)$$

Выражение (10.11) следует теперь представить в виде (15.3). Это позволит связать коэффициенты  $C_{\ell}$  и фазы  $\delta_{\ell}$  с амплитудой рассеяния  $f(\vartheta)$ . Проще всего привести (10.11) к виду аналогичному (15.3), разложив выражение (10.11) по полиномам Лежандра. При этом нам понадобится разложение плоской волны  $e^{ikz}$  только на больших расстояниях от центра рассеяния, которое можно найти следующим образом.

Запишем плоскую волну в следующем виде

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \vartheta) G_{\ell}(r), \quad (15.4)$$

где  $G_{\ell}(r)$  - неизвестная функция  $r$ . Умножая (15.4) на  $P_{\ell}(\cos \vartheta) \sin \vartheta$  и интегрируя по  $\vartheta$ , получим

$$\frac{1}{2i^{\ell}} \int_{-1}^1 e^{ikrx} P_{\ell}(x) dx = G_{\ell}(r). \quad (15.5)$$

Здесь мы использовали условия ортогональности и нормировки полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^{+1} P_{\ell}^2(x) dx = \frac{2}{2\ell + 1}. \quad (15.6)$$

Интегрируя по частям левую часть (15.5), получим

$$G_\ell(r) = \frac{i^{-\ell}}{2ikr} e^{ikrx} P_\ell(x) \Big|_{-1}^{+1} + \text{члены порядка } \frac{1}{r^2}. \quad (15.7)$$

Используя, наконец, известное свойство полиномов Лежандра  $P_\ell(1) = 1$  и  $P_\ell(-1) = (-1)^\ell$ , получаем для функции  $G_\ell(r)$  на больших расстояниях:

$$G_\ell(r) = \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}{kr}. \quad (15.8)$$

Таким образом, разложение плоской волны на больших расстояниях представляется в виде

$$e^{ikz} = \sum_i i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \vartheta) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}{kr}. \quad (15.9)$$

Разложим также  $f(\vartheta)$  в ряд по полиномам Лежандра

$$f(\vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} D_\ell P_\ell(\cos \vartheta). \quad (15.10)$$

Подставляя в (10.11) ряды (15.9) и (15.10) и приравнявая найденное выражение и выражение (15.3), найдем

$$\begin{aligned} & \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell \frac{P_\ell(\cos \vartheta)}{2ikr} \left( e^{i\left(kr + \delta_\ell - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr + \delta_\ell - \frac{\pi\ell}{2}\right)} \right) = \\ & = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[ \frac{i^\ell (2\ell + 1)}{2ikr} \left( e^{i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} \right) + D_\ell \frac{e^{ikr}}{r} \right] P_\ell(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (15.11)$$

Для выполнения равенства (15.11) при произвольных значениях угла  $\vartheta$  необходимо, чтобы были равны между собой коэффициенты при каждом из полиномов  $P_\ell$ . Приравнявая эти коэффициенты, получим

$$\begin{aligned} & \frac{C_\ell}{2ikr} \left( e^{i\left(kr+\delta_\ell-\frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr+\delta_\ell-\frac{\pi\ell}{2}\right)} \right) = \\ & = \frac{i^\ell(2\ell+1)}{2ikr} \left( e^{i\left(kr-\frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr-\frac{\pi\ell}{2}\right)} \right) + D_\ell \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned} \quad (15.11)$$

Последнее соотношение должно выполняться при произвольном значении радиуса  $r$ . Это означает, что коэффициенты у экспонент с одинаковыми показателями должны быть равны между собой. Отсюда находим следующие соотношения между коэффициентами:

$$\begin{aligned} C_\ell &= i^\ell(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}, \\ i^\ell(2\ell+1) + 2ikD_\ell e^{\frac{i\pi\ell}{2}} &= C_\ell e^{i\delta_\ell}. \end{aligned} \quad (15.12)$$

Находя отсюда  $D_\ell$  и подставляя в разложение (15.10), получим для амплитуды рассеяния следующее выражение

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left[ e^{2i\delta_\ell} - 1 \right] P_\ell(\cos \vartheta). \quad (15.13)$$

Дифференциальное эффективное сечение будет следовательно, равно

$$d\sigma = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left[ e^{2i\delta_\ell} - 1 \right] P_\ell(\cos \vartheta) \right|^2 d\Omega. \quad (15.14)$$

Полное эффективное сечение найдем, интегрируя (15.14) и учитывая соотношения ортогональности для полиномов Лежандра:

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (15.15)$$

Мы видим, что дифференциальное эффективное сечение и полное сечение рассеяния частицы в заданном поле сил выражаются через совокупность фаз  $\delta_\ell$ . Отсюда следует, что для вычисления сечений рассеяния необходимо найти решение уравнения Шредингера (13.7) для частицы, движущейся в данном силовом поле. Определяя вид решения на больших расстояниях и сравнивая с (15.2), находим  $\delta_\ell$ . Точное решение уравнения

Шредингера позволяет найти все бесконечное множество фаз  $\delta_\ell$  и, следовательно, значение сечения рассеяния. Точная или фазовая теория рассеяния была впервые развита Рэлеем, изучавшим рассеяние звуковых волн. Для решения задач квантовой механики метод Рэля был впервые применен Факсеном и Хольцмарком.

Из (15.15) видно, что полное сечение можно представить в виде суммы так называемых парциальных сечений

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell, \quad \sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (15.16)$$

## Лекция № 16

### §16. Общая теория неупругого рассеяния и поглощения частиц.

До сих пор мы ограничивались рассмотрением процесса упругого рассеяния. Перейдем теперь к общему случаю, когда возможно и неупругое рассеяние.

Неупругими называются всякие процессы, при которых изменяется внутреннее состояние частиц. Так, например, неупругими будут столкновения, сопровождающиеся возбуждением (например, возбуждением атома или ядра), распадом или образованием новых частиц и т.д. Каждый из возможных процессов именуется соответствующим каналом реакции. Если процесс совместим с законами сохранения, канал называется открытым. В дальнейшем мы будем рассматривать процессы, для которых открыты упругий и неупругий каналы реакции. Начнем с некоторого обобщения фазовой теории рассеяния. Это позволит нам охватить одновременно процессы упругого и неупругого рассеяния и поглощения.

Для формального описания любого процесса рассеяния окружим мысленно рассеивающий центр сферой достаточно большого радиуса  $R_0$ . Рассмотрим характер  $\ell$ -й парциальной волны при  $r > R_0$  в трех случаях:

- 1) в начале координат нет рассеивающего центра;
- 2) в начале координат находится рассеивающий центр, причем частица испытывает только упругое рассеяние;
- 3) в начале координат находится рассеивающий центр, на котором частица претерпевает неупругое рассеяние.

В первом случае радиальная функция  $\ell$ -й парциальной волны может быть в соответствии с (14.10) написана в виде суперпозиции двух волн

$$R_\ell = a_\ell \frac{e^{i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}}{2ikr} - a_\ell \frac{e^{-i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}}{2ikr} = a_\ell \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}{kr}. \quad (16.1)$$

Первое слагаемое представляет расходящуюся волну, второе – сходящуюся. При этом мы используем асимптотические выражения, поскольку, по предположению  $R_0$  достаточно велико. Амплитуды и фазы обеих волн одинаковы и волновая функция (16.1) является произведением вещественной функции на постоянный вещественный множитель. Поэтому поток плотности вероятности через замкнутую поверхность равен нулю:

$$j_\ell = \frac{\hbar}{2mi} \int \left( \psi_\ell^* \frac{\partial \psi_\ell}{\partial r} - \psi_\ell \frac{\partial \psi_\ell^*}{\partial r} \right) r^2 d\Omega = 0, \quad (16.2)$$

где  $\psi_\ell = R_\ell(r)P_\ell(\cos\theta)$ .

Во втором случае радиальная функция  $\ell$ -й парциальной волны, согласно (15.2), запишется в виде

$$R_\ell(r) = B_\ell \frac{\sin\left(kr + \delta_\ell - \frac{\pi\ell}{2}\right)}{kr} = F_\ell \frac{e^{2i\delta_\ell} e^{i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}}{2ikr}. \quad (16.3)$$

Амплитуды сходящейся и расходящейся волн отличаются друг от друга фазовым множителем  $e^{2i\delta_\ell}$ , причем  $e^{2i\delta_\ell}$ . В этом случае полный парциальный поток плотности вероятности через поверхность какой – либо сферы равен нулю, так как парциальная волновая функция, зависящая от  $\ell$ , - вещественна. Отсюда следует, что расходящийся и сходящийся потоки  $\ell$ -й парциальной волны равны между собой. Тот факт, что сходящаяся и расходящаяся волны имеют разные коэффициенты,  $e^{2i\delta_\ell}$  и единицу, не противоречит этому равенству, так как  $e^{2i\delta_\ell}$ .

В третьем случае, когда частицы испытывают неупругое рассеяние, написать общее выражение для радиальной функции с учетом всех возможных неупругих процессов не представляется возможным. Мы можем, однако, упростить задачу, если рассматривать отдельно упругое рассеяние и всевозможные виды неупругого рассеяния.

Для радиальной функции  $\ell$ -й парциальной волны, описывающей неупругое рассеяние частицы, в этом случае можно написать следующее формальное выражение:

$$R_\ell(r) = b_\ell \frac{S_\ell e^{i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}}{2ikr}. \quad (16.4)$$

Это выражение построено по тому же принципу, что и выражение (16.3), однако оно учитывает специфику процесса, при котором совместно с упругим рассеянием могут существовать неупругие процессы или поглощение. Введенный коэффициент  $S_\ell$  при наличии неупругих процессов может быть по модулю меньше единицы. Это отражает тот факт, что при наличии поглощения или неупругого рассеяния сходящийся поток частиц больше расходящегося. При этом волновая функция запишется в виде

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_\ell \psi_\ell = \sum_\ell P_\ell(\cos\theta) R_\ell(r) = \\ &= \sum_\ell b_\ell \frac{S_\ell e^{i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)}}{2ikr} P_\ell(\cos\theta) \end{aligned} \quad (16.5)$$

Коэффициенты  $b_\ell$  в этом случае также определяются из требования, чтобы волновая функция (16.5) совпадала с выражением (10.11). Прodelывая вычисления, аналогичные тем, которые были нами проделаны в Лекции 15 при рассмотрении упругого рассеяния, получим волновую функцию в следующем виде

$$\psi = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i^\ell}{2ikr} (2\ell + 1) \left[ S_\ell e^{i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} \right] P_\ell \cos\theta. \quad (16.6)$$

Нетрудно показать, что в этом случае поток частиц через сферу  $r > R_0$  отличен от нуля. Действительно, имеем

$$\frac{\partial \psi_\ell}{\partial r} = \frac{i^\ell P_\ell \cos\theta}{2ikr} (2\ell + 1) \left[ ik S_\ell e^{i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} + ike^{-i\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right)} \right]. \quad (16.7)$$

При этом в выражении (16.7) удержаны только члены, пропорциональные  $1/r$ . Члены пропорциональные  $1/r^2$ , опущены, поскольку мы хотим найти поток через сферу большого радиуса.

Вычислим полный поток частиц через сферу радиуса  $r > R_0$ . Он равен

$$j_\ell = \frac{i\hbar}{2m} r^2 \int \left( \psi_\ell^* \frac{\partial \psi_\ell}{\partial r} - \psi_\ell \frac{\partial \psi_\ell^*}{\partial r} \right) d\Omega. \quad (16.8)$$

Подставляя выражения (16.6) и (16.7) и учитывая условия нормировки полиномов Лежандра  $P_\ell(\cos\theta)$

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^2(x) dx = \frac{2}{2\ell + 1}, \quad (16.9)$$

получаем

$$j_\ell = -\frac{\pi\hbar}{mk} (2\ell + 1) (1 - |S_\ell|^2). \quad (16.10)$$

Так как  $|S_\ell| < 1$ , то поток отрицателен. Это означает, что полный поток направлен внутрь сферы.

Легко понять смысл полученного результата: поток падающих на центр частиц с моментом  $\ell$  превышает поток рассеянных частиц. Частицы испытывают неупругое рассеяние или поглощение, и интенсивность пучка рассеянных частиц снижается. Ясно, что, разделив поток  $j_\ell$  на плотность потока падающих частиц, мы найдем в соответствии с определением парциальное эффективное сечение неупругого рассеяния. При этом под неупругим рассеянием понимается совокупность всех процессов, снижающих интенсивность упругого рассеяния. Так как плотность потока падающих частиц равна  $v$ , то для  $\ell$ -го парциального эффективного сечения неупругого рассеяния получаем

$$\sigma_{\ell \text{ неупр}} = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) (1 - |S_\ell|^2). \quad (16.11)$$

Что же касается амплитуды упругого рассеяния, то для нее можно, не повторяя выкладок лекции 15, написать выражение

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (S_\ell - 1) P_\ell(\cos\theta), \quad (16.12)$$

так как (16.3) отличается от (16.4) заменой  $e^{2i\delta_\ell}$  на  $S_\ell$ .

Совокупность комплексных величин  $S_\ell$  определяет эффективное сечение как неупругого, так и упругого рассеяния. В частности, если  $S_\ell = e^{2i\delta_\ell}$ , где  $\delta_\ell$  вещественно, то эффективное сечение неупругого рассеяния обращается в нуль, а амплитуда упругого рассеяния совпадает с его выражением (15.13).

Наряду с  $\ell$ -м парциальным эффективным сечением упругого и неупругого процессов можно написать и полные эффективные сечения процессов.

Полное эффективное сечение процесса неупругого рассеяния равно, очевидно,

$$\sigma_{\text{неупр}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_{\ell} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (1 - |S_{\ell}|^2), \quad (16.13)$$

а полное эффективное сечение для упругого процесса равно

$$\sigma_{\text{упр}} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) |1 - S_{\ell}|^2. \quad (16.14)$$

Структура выражения (16.3) и физический смысл множителя  $1 - |S_{\ell}|^2$  можно пояснить с помощью следующих рассуждений, основанных на квазиклассическом приближении.

Прицельный параметр соударения частицы может быть записан в виде

$$\rho_{\ell} = \frac{\hbar}{p} \sqrt{\ell(\ell + 1)}. \quad (16.15)$$

При больших  $\ell$  для параметра столкновений получим

$$\rho_{\ell} = \frac{\hbar}{p} \ell. \quad (16.16)$$

Поверхность кольца, лежащего между двумя окружностями радиусов  $\rho_{\ell}$  и  $\rho_{\ell+1}$ , равна

$$2\pi\rho_{\ell} \frac{\hbar}{p} \approx \frac{\pi\hbar^2}{p^2} (2\ell + 1). \quad (16.17)$$

Число частиц, которые проходят через это кольцо, ориентированное перпендикулярно к падающему потоку, может быть легко найдено. Например, если плотность потока падающих частиц равна единице,

то число частиц, пересекающих кольцо, равно  $\frac{\pi\hbar^2}{p^2} (2\ell + 1)$ .

Введем так называемый коэффициент прилипания  $\xi_{\ell}$ , который по определению представляет собой отношение числа поглощенных частиц, упавших на заданную поверхность, к полному числу частиц падающих на ту же поверхность. Число частиц, поглощенных поверхностью кольца, ограниченного окружностями радиусов  $\rho_{\ell}$  и  $\rho_{\ell+1}$ , равна

$$\frac{\pi\hbar^2}{p^2} (2\ell + 1) \xi_{\ell},$$

и соответственно эффективное сечение поглощения будет иметь вид

$$\sigma_{\ell \text{ неупр}} = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) \xi_{\ell}. \quad (16.18)$$

Сравнивая (16.18) и (16.13), видим, что

$$1 - |S_{\ell}|^2 = \xi_{\ell},$$

то есть величина  $1 - |S_{\ell}|^2$  имеет смысл коэффициента прилипания.

Наконец, получим еще формулу, связывающую эффективное сечение упругого и неупругого рассеяния. Оказывается, что имеет следующее равенство:

$$\frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) = \sigma_{\text{неупр}} + \sigma_{\text{упр}}. \quad (16.19)$$

Для получения этого соотношения вычислим сумму упругого и неупругого эффективных сечений. С помощью выражений (16.13) и (16.14) получим

$$\sigma_{\text{неупр}} + \sigma_{\text{упр}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (2 - S_{\ell} - S_{\ell}^*) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (2 - 2 \text{Re} S_{\ell}). \quad (16.20)$$

С другой стороны, так как полиномы Лежандра при  $\theta = 0$  равны единице, то согласно (16.12) для амплитуды рассеяния получаем

$$f(0) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (S_{\ell} - 1), \quad (16.21)$$

а мнимая часть амплитуды рассеяния равна

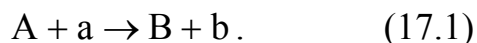
$$\text{Im} f(0) = \frac{1}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (1 - \text{Re} S_{\ell}). \quad (16.22)$$

Сравнивая полученные выражения (16.22) и (16.20) убеждаемся в справедливости (16.19). Мы показали, таким образом, что сумма эффективных сечений неупругого и упругого рассеяния пропорциональна мнимой части амплитуды рассеяния, взятой при значении угла  $\theta = 0$ . Формула (16.19) носит название оптической теоремы.

## Лекция № 17

### §17. Формула Брейта-Вигнера.

Теперь мы изучим некоторые явления, происходящие при ядерных реакциях типа



Здесь  $A$  и  $B$  – начальное и конечное ядра,  $a$  – падающая частица и  $b$  – частица, вылетающая в результате реакции. Чтобы не учитывать

усложнений, связанных с учетом вклада электромагнитного поля, мы ограничимся случаем, когда падающая и вылетающая частицы являются нейтронами.

Изучение реакций, вызванных нейтронами со сравнительно небольшими энергиями показало, что эффективное сечение реакции в зависимости от энергии падающих нейтронов обнаруживает максимумы при определенных значениях энергии. Явление имеет ярко выраженный резонансный характер – максимумы отвечают весьма узким интервалам энергии нейтронов.

Для объяснения резонансного характера ядерных реакций Н Бором была предложена следующая общая схема протекания ядерных реакций: нейтрон  $a$ , проникающий в ядро сильно взаимодействует с ядерными нуклонами и передает им свою избыточную энергию. Последняя равна, очевидно сумме его кинетической энергии  $E_a$  и энергии связи нейтрона в ядре  $E_{св}$ . Привнесенная нейтроном энергия быстро распределяется между всеми нуклонами ядра, так как нуклоны сильно взаимодействуют между собой. В результате из ядра  $A$  и нейтрона возникает новое, так называемое промежуточное ядро  $C$ . Промежуточное ядро не является стабильной системой, поскольку его энергия выше энергии нормального состояния на величину  $E_a + E_{св}$ . По прошествии некоторого времени жизни промежуточное ядро будет переходить в невозбужденное состояние. Этот переход может происходить при малых энергиях возбуждения двумя путями:

Во-первых, в результате флуктуации на одной из ядерных частиц может сконцентрироваться вся энергия возбуждения. Эта частица (для простоты рассуждений - нейтрон) получает возможность вылететь из ядра, обладая при этом энергией  $E_a$ . Очевидно, что этот путь реакции отвечает упругому рассеянию нейтрона ядром;

Во-вторых, энергия возбуждения может уноситься нейтроном не полностью, а лишь частично. Остаток энергии возбуждения излучается ядром в виде  $\gamma$ -кванта. В этом случае имеет место неупругое рассеяние нейтрона. Частным случаем последней реакции служит реакция радиационного захвата нейтрона, при которой вся энергия возбуждения уносится  $\gamma$ -квантом и нейтрон остается в ядре.

Для эффективных сечений упругого и неупругого рассеяния можно воспользоваться формулами (16.13) и (16.14). Мы ограничимся при этом случаем медленных нейтронов, описываемых  $S$ -волной. Ядро будем считать сферой радиуса  $R$ . Хотя ядро нельзя считать имеющим резкую геометрическую границу, его размытость весьма мала по сравнению с длиной волны падающего нейтрона  $\lambda \gg R$ .

На поверхности ядра  $r = R$  должно иметь смыкание волновых функций, описывающих нейтрон вне и внутри ядра. Для этого должны выполняться условия

$$\psi = \psi_{\text{вн}}, \quad \frac{d\psi}{dr} = \frac{d\psi_{\text{вн}}}{dr}. \quad (17.2)$$

Соответствующая энергия определяется значением нормальной производной волновой функции на поверхности ядра. Обозначим через  $f(E)$  величину

$$f(E) = R \left( \frac{\frac{d}{dr}(r\psi)}{r\psi} \right)_{r=R}. \quad (17.3)$$

Величина  $f(E)$  непосредственно связана с нормальной производной  $\left( \frac{d\psi}{dr} \right)_{r=R}$  и зависит от энергии нейтрона  $E$ . Легко выразить через  $f$  величину  $S_0$ , определяющую эффективное сечение упругого и неупругого рассеяния  $s$ -волны.

Подставляя в (17.3) значение  $\psi$  из (16.4), получим

$$f = -i \frac{k R e^{-ikR} + k R S_0 e^{ikR}}{e^{-ikR} - S_0 e^{ikR}}. \quad (17.4)$$

Действительно

$$r R_\ell = b_\ell \left[ S_0 e^{\left( ikr - \frac{\pi\ell}{2} \right)} - e^{-\left( ikr - \frac{\pi\ell}{2} \right)} \right], \quad (17.5)$$

$$\frac{d}{dr}(r R_\ell) = b_\ell \left[ ik S_0 e^{\left( ikr - \frac{\pi\ell}{2} \right)} + ik e^{-\left( ikr - \frac{\pi\ell}{2} \right)} \right], \quad (17.6)$$

подставляя (17.5) и (17.6) в (17.3), получим (17.4).

Из (17.4) следует, что

$$S_0 = -e^{-2ikR} \frac{kR - if(E)}{kR + if(E)}. \quad (17.7)$$

Поскольку  $f(E)$  является, вообще говоря, комплексной величиной, можно написать:

$$f(E) = f_1(E) - if_2(E), \quad (17.8)$$

где  $f_1(E)$  и  $f_2(E)$  - вещественные функции. Поскольку всегда  $|S_0| \leq 1$ , функция  $f_2(E) \geq 0$ .

С учетом (17.8), для  $S_0$  имеем

$$S_0 = -e^{-2ikR} \frac{kR - if_1(E) - f_2(E)}{kR + if_1(E) + f_2(E)}. \quad (17.9)$$

Подставляя это значение  $S_0$  в (16.13), находим

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k^2} (1 - |S_0|^2) = \frac{\pi}{k^2} \frac{kRf_2}{(kR + f_2)^2 + f_1^2}. \quad (17.10)$$

Аналогично из (16.14) следует

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{упр}} &= \frac{\pi}{k^2} |1 - S_0|^2 = \frac{\pi}{k^2} \left| 1 + e^{-2ikR} \frac{kR - if_1 - f_2}{kR + if_1 + f_2} \right|^2 = \\ &= \frac{\pi}{k^2} \left| e^{-ikR} \frac{kR \cos(kR) - f_1 \sin(kR) + if_2 \sin(kR)}{kR + if_1 + f_2} \right|^2 = \\ &= \frac{\pi}{k^2} \left| \frac{kR}{i(kR + f_2) - f_1} + e^{ikR} \sin(kR) \right|^2. \end{aligned} \quad (17.11)$$

Рассмотрим прежде формулу (17.10). Поскольку  $f_2(E) \geq 0$ , эффективное сечение имеет максимум при  $f_1(E_0) = 0$ . При энергии нейтрона равной  $E_0$ , он с относительно большой вероятностью проникает внутрь ядра. Соответственно этому энергии  $E_0$  отвечает резонансному значению энергии ядра. Вблизи резонансной энергии функцию  $f_1(E)$  можно разложить в ряд по степеням  $(E - E_0)$  и ограничиться первым членом разложения

$$f_1(E) = f'(E_0)(E - E_0).$$

Можно показать, что величина  $f'(E_0) < 0$ . Введем обозначения

$$\Gamma_e = -\frac{2kR}{f'(E_0)}; \quad \Gamma_r = -\frac{2f_2}{f'(E_0)}; \quad \Gamma = \Gamma_e + \Gamma_r. \quad (17.12)$$

Тогда находим, что

$$\sigma_{\text{неупр}} \approx \frac{\pi}{k^2} \frac{\Gamma_e \Gamma_r}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \quad (17.13)$$

В формуле (17.11) для  $\sigma_{\text{упр}}$  при  $E \approx E_0$  обычно первое слагаемое велико по сравнению со вторым и может быть записано в виде

$$(\sigma_e)_{\text{упр}} \approx \frac{\pi}{k^2} \frac{\Gamma_e^2}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}. \quad (17.14)$$

Формулы для сечений упругого и неупругого рассеяния медленных нейтронов носят названия формул Брейта-Вигнера.

Формулы Брейта-Вигнера были получены нами в частном случае, когда энергия нейтрона близка к одному из резонансных уровней ядра  $E_0$ . Они могут быть обобщены на случай многих уровней. В них могут быть учтены спиновые состояния ядра и легких частиц. Наконец, формулы Брейта-Вигнера могут быть обобщены на случай заряженных частиц и частиц с моментом.

## Лекция № 18

### §18. Связь между величинами $S_\ell$ фазовой теории рассеяния и матричными элементами матрицы рассеяния $S$ .

Основываясь на соотношении (1.18), можно выразить эффективное сечение процесса через матричные элементы оператора  $\mathcal{S}$  (см. лекц.№1). Однако предварительно необходимо получить выражение для вероятности перехода в единицу времени.

Предположим, что начальное состояние  $\psi_a$  характеризуется определенным значением энергии  $E_a$ . Полная энергия системы сохраняется во времени. Поэтому матрицу  $S_{ba}$  можно представить в виде

$$S_{ba} = S_{ba}^E \delta(E_a - E_b). \quad (18.1)$$

О матрице  $S_{ba}^E$  говорят, что она задана на энергетической поверхности. Тогда вероятность перехода запишется в виде

$$W'_{ba} = |S_{ba}|^2 = |S_{ba}^E|^2 \delta^2(E_a - E_b). \quad (18.2)$$

Эта вероятность пропорциональна квадрату  $\delta$  функции. Одну из  $\delta$  функций представим в виде

$$\delta(E_a - E_b) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \exp \frac{i}{\hbar} (E_a - E_b) t dt. \quad (18.3)$$

Подставляя это соотношение в (18.2) и интегрируя вероятность перехода по энергии конечного состояния, получим вероятность перехода за время  $T$ :

$$\bar{W}_{ba} = \int W'_{ba} dE_b = \frac{1}{2\pi\hbar} |S_{ba}^E|^2 T. \quad (18.4)$$

Отсюда находим для вероятности перехода в единицу времени

$$W = \frac{1}{2\pi\hbar} |S_{ba}^E|^2. \quad (18.5)$$

Для нахождения сечения процесса мы должны разделить вероятность перехода на плотность потока падающих частиц.

В начальном состоянии имеются две частицы. Процесс рассеяния рассматриваем, как обычно, в системе центра тяжести. Волновая функция начального состояния  $\psi_a$  описывает состояния с заданной энергией относительного движения  $E_a$  и направлением импульса относительного движения  $\vec{n}_a = \frac{\vec{p}_a}{p_a}$  и нормирована

условием

$$\int \psi_{E_a \vec{n}}^* \psi_{E'_a \vec{n}'} dV = \delta(E_a - E'_a) \delta(\vec{n}_a - \vec{n}'_a) = p_a^2 \frac{d\mathbf{p}}{dE} \delta(\vec{p}_a - \vec{p}'_a).$$

(18.6)

Тогда

$$\psi_{E_a \vec{n}} = |E_a, \vec{n}\rangle = p_a \sqrt{\frac{d\mathbf{p}}{dE}} \psi_{\vec{p}_a} = \frac{p_a}{\sqrt{v_a}} |\vec{p}_a\rangle, \quad (18.7)$$

где согласно (4.40)  $|\vec{p}_a\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}$ .

При этом согласно (10.8) плотность потока падающих частиц равна

$$\vec{j}_0 = \frac{p_a^2}{(2\pi\hbar)^3} \vec{n}_a. \quad (18.8)$$

Как всегда, когда мы имеем дело с непрерывно изменяющейся величиной, мы должны ввести дифференциальную вероятность перехода  $dW_{ba}$  и, следовательно, дифференциальное эффективное сечение  $d\sigma_{ba}$ . Обозначая через  $d\Omega_b$  интервал телесного ядра, в котором лежит вектор  $\vec{n}_b$ , получаем с помощью (18.5) и (18.8)

$$d\sigma_{ba} = \frac{dW_{ba}}{|\vec{j}_0|} = \frac{4\pi^2}{k_a^2} \left| \langle b, E, \vec{n}_b | S^E | a, E, \vec{n}_a \rangle \right|^2 d\Omega_b, \quad (18,9)$$

где  $k_a = \frac{p_a}{\hbar}$ .

Рассмотрим теперь случай, когда в результате взаимодействия двух частиц может происходить упругое и различные виды неупругого взаимодействия, то есть

$$A + B \rightarrow \begin{cases} A + B \\ C + D \\ C' + D' \end{cases}$$

Каждый вид превращения называется каналом реакции.

Формула (18,9) при  $b \neq a$  отвечает неупругому каналу реакции.

Сечение с учетом упругого и неупругого каналов можно представить в виде

$$d\sigma_{ba} = \frac{dW_{ba}}{|\vec{j}_0|} = \frac{4\pi^2}{k_a^2} \left| \langle \mathbf{b}, E, \vec{n}_b | S^E - I | \mathbf{a}, E, \vec{n}_a \rangle \right|^2 d\Omega_b, \quad (18,10)$$

где  $I$  – единичная матрица. Поскольку у матрицы  $I$  отличны от нуля только диагональные элементы, при  $b \neq a$  сечение (18.10) совпадает с (18.9).

Выражения (18.9) и (18.10) можно представить в виде, аналогичном ( ), если разложить начальное состояние  $|\mathbf{a}, E, \vec{n}_a\rangle$  по парциальным волнам

$$|\mathbf{a}, E, \vec{n}_a\rangle = \sum_{\ell, m} \langle \mathbf{a}, E, \ell, m | \mathbf{a}, E, \vec{n}_a \rangle |\mathbf{a}, E, \ell, m\rangle. \quad (18.11)$$

Функции преобразования  $\langle \mathbf{a}, E, \ell, m | \mathbf{a}, E, \vec{n}_a \rangle$  были найдены ранее

$$\langle \mathbf{a}, E, \ell, m | \mathbf{a}, E, \vec{n}_a \rangle = \langle \ell, m | \vec{n}_a \rangle = Y_{\ell m}^*(\vec{n}_a). \quad (18.12)$$

Выбирая ось  $z$  вдоль вектора  $\vec{n}_a$ , получаем

$$Y_{\ell m}(\vec{n}_a) = Y_{\ell m}(0) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m0}. \quad (18.13)$$

При подстановке выражений (18.12), (18.13) в (18.9) и (18.10) возникнут матричные элементы вида

$$\langle \mathbf{b}, E, \vec{n}_b | S^E | \mathbf{a}, E, \ell, 0 \rangle.$$

При движении в центральном поле момент количества движения сохраняется, поэтому  $S$  – матрица диагональна по квантовым числам  $\ell, m$   $\langle \ell' m' | S | \ell, m \rangle = S^\ell \delta_{\ell' \ell} \delta_{m' m}$  и можно написать

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{b}, E, \vec{n}_b | S^E | \mathbf{a}, E, \ell, 0 \rangle &= \langle \vec{n}_b | \ell, 0 \rangle \langle \mathbf{b}, E, \ell, 0 | S^E | \mathbf{a}, E, \ell, 0 \rangle = \\ &= Y_{\ell 0}(\vec{n}_b) \langle \mathbf{b}, E, \ell, 0 | S^E | \mathbf{a}, E, \ell, 0 \rangle = P_\ell(\cos \theta_b) \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} S_{ba}^\ell. \end{aligned} \quad (18.14)$$

Соответственно для дифференциального сечения рассеяния в телесный угол  $d\Omega_b$  получаем

$$d\sigma_{ba} = \frac{1}{4k_a^2} \left| \sum_{\ell} (2\ell+1) (S_{ba}^\ell - \delta_{ba}) P_\ell(\cos \theta) \right|^2 d\Omega_b. \quad (18.15)$$

Интегрируя это выражение по всем направлениям вектора  $\vec{n}_b$ , получим эффективное сечение  $a \rightarrow b$

$$\sigma_{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left| S_{ba}^{\ell} - \delta_{ba} \right|^2. \quad (18.16)$$

Из последнего выражения следует, что полное сечение упругого рассеяния имеет вид

$$\sigma_{aa} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left| S_{ba}^{\ell} - 1 \right|^2. \quad (18.17)$$

Напишем выражение также для полного сечения всех неупругих процессов, которое получается суммированием  $\sigma_{ba}$  по всем каналам  $b \neq a$

$$\sigma_{\text{неупр}} = \sum_{b \neq a} \sigma_{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{b \neq a} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left| S_{ba}^{\ell} \right|^2. \quad (18.18)$$

Это выражение можно преобразовать, воспользовавшись унитарностью S-матрицы,

$$\sum_{b \neq a} \left| S_{ba}^{\ell} \right|^2 = 1 - \left| S_{aa}^{\ell} \right|^2. \quad (18.19)$$

Соответственно получаем

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left( 1 - \left| S_{aa}^{\ell} \right|^2 \right). \quad (18.20)$$

Формулы (18.20) и (18.17) совпадают с формулами фазовой теории рассеяния (16.13) и (16.14). Мы видим, что введенные в фазовой теории рассеяния величины  $S_{\ell}$  являются диагональными матричными элементами матрицы рассеяния S. Если неупругие процессы невозможны, то есть  $S_{ba}^{\ell} = 0$  при  $b \neq a$ , то из соотношения унитарности (18.19) следует, что

$$\left| S_{ba}^{\ell} \right|^2 = 1, \text{ следовательно, } S_{ba}^{\ell} = e^{2i\delta_{\ell}}. \quad (18.21)$$

При этом выражения (18.15) и (18.17) совпадают с выражениями для сечения упругого рассеяния, полученными в фазовой теории рассеяния.

## Лекция № 19

### §19. Обращение времени и принцип детального равновесия

Рассмотрим свойства S-матрицы, связанные с симметрией уравнения Шредингера по отношению к обращению времени. Симметрия по отношению к обращению времени означает, что существует решение  $\psi_{\text{обр}}(x, t)$  «обращенного» уравнения Шредингера, выражающееся через функцию  $\psi(x, -t)$ .

Если оператор  $\hat{H}$  не зависит от времени явно, то

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, -t)}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^*(x, -t). \quad (19.1)$$

При  $\hat{H}^* = \hat{H}$  уравнение (19.1) совпадает с исходным уравнением Шредингера, а функция  $\psi^*(x, -t)$  описывает процесс, обращенный во времени. В более общем случае (например, заряженная частица в магнитном поле) мы должны положить

$$\psi_{\text{обр}}(x, t) = \hat{V} \psi^*(x, -t), \quad (19.2)$$

где  $\hat{V}$  - некоторый оператор. Действуя на уравнение (19.1) слева оператором  $\hat{V}$ , получим уравнение для функции  $\psi_{\text{обр}}(x, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\text{обр}}(x, t)}{\partial t} = \hat{V} \hat{H}^* \hat{V}^{-1} \psi_{\text{обр}}(x, t). \quad (19.3)$$

Это уравнение совпадает с исходным уравнением Шредингера при условии

$$\hat{V} \hat{H}^* = \hat{H} \hat{V}. \quad (19.4)$$

Из эрмитовости оператора  $\hat{H}$  следует, что оператор  $\hat{V}$  должен быть унитарным, т. е.  $\hat{V}^{-1} = \hat{V}^+$ . Закону преобразования волновых функций (19.2) отвечает определенный закон преобразования и произвольных операторов  $\hat{F}$ . Этот закон может быть найден обычными методами (см. Лекц. №3).

Некоторая специфика в данном случае возникает лишь в связи с тем, что оператор  $\hat{V}$  действует не на функцию  $\psi$ , а на функцию  $\psi^*$ . Оператор  $\hat{F}_{\text{обр}}$  (обращенный во времени) мы найдем, исходя из требования, что матричный элемент оператора  $\hat{F}$ , взятый по функциям  $\psi_{\text{обр}}(x, t)$ , должен совпадать с матричным элементом оператора  $\hat{F}_{\text{обр}}$ , взятый по функциям  $\psi(x, -t)$ :

$$\langle \psi_{\text{обр}} | \hat{F} | \psi_{\text{обр}} \rangle = \langle \psi(-t) | \hat{F}_{\text{обр}} | \psi(-t) \rangle. \quad (19.5)$$

Используя соотношение (19.2), получаем

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\text{обр}} | \hat{F} | \psi_{\text{обр}} \rangle &= \langle \hat{V} \psi^*(-t) | \hat{F}_{\text{обр}} | \hat{V} \psi^*(-t) \rangle = \\ &= \langle \psi^*(-t) | \hat{V}^+ \hat{F}_{\text{обр}} \hat{V} | \psi^*(-t) \rangle. \end{aligned} \quad (19.6)$$

Отсюда следует

$$\tilde{\mathbb{F}}_{\text{обр}} = \mathbb{V}^+ \mathbb{F} \mathbb{V}, \quad (19.7)$$

где через  $\tilde{\mathbb{F}}_{\text{обр}}$  обозначен оператор, транспонированный к оператору  $\mathbb{F}_{\text{обр}}$ . Как легко видеть из (19.4) и (19.7), оператор  $\mathbb{H}$  инвариантен по отношению к обращению времени, т. е.  $\mathbb{H}_{\text{обр}} = \mathbb{H}$ . При этом мы использовали условие эрмитовости гамильтониана  $\tilde{\mathbb{H}} = \mathbb{H}^*$ . Соотношение (19.7) может служить основой для нахождения оператора  $\mathbb{V}$ . Действительно, естественно потребовать, чтобы квантовые операторы при обращении времени преобразовывались бы так же, как и соответствующие классические величины. Такие величины, как энергия, координата, напряженность электрического поля и т. д. инвариантны по отношению к обращению времени. Инвариантны должны быть и соответствующие операторы. Скорость, импульс, момент количества движения, напряженность магнитного поля и т. д. изменяют знак при обращении времени. Таким же свойством должны обладать и соответствующие операторы. Например, должны выполняться соотношения

$$\mathbb{E}_{\text{обр}} = \mathbb{E}, \quad \mathbb{P}_{\text{обр}} = -\mathbb{P}. \quad (19.8)$$

Инвариантность уравнения Шредингера по отношению к обращению времени означает, что всегда можно найти оператор  $\mathbb{V}$ , удовлетворяющий условию (19.4). Однако открытые в 1964 г. аномалии при распаде К-мезонов показывают, что, по-видимому, при определенных условиях принцип обратимости времени может нарушаться. Из инвариантности гамильтониана  $\mathbb{H}$  по отношению к замене  $t \rightarrow -t$  следует инвариантность  $S$  – матрицы, т.е. выполняется соотношение

$$\mathbb{V}^+ \mathbb{S} \mathbb{V} = \tilde{\mathbb{S}}. \quad (19.9)$$

Справедливость этого соотношения легко проверяется, с учетом (19.4), для эволюционного оператора  $\mathbb{V}(t, t_0)$  [см. Лекц.1], Так как

оператор  $\mathcal{S}$  определяется как предел оператора  $\mathcal{V}(t, t_0)$ , то он также удовлетворяет соотношению (19.9).

Основываясь на соотношении (19.9), не представляет труда установить связь непосредственно между матричными элементами  $S$  - матрицы для прямых и обратных реакций. Обозначим через  $\psi_a$  и  $\psi_b$  волновые функции начального и конечного состояния системы.

Тогда, учитывая (19.2) и (19.9), имеем

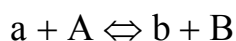
$$\begin{aligned} \langle \psi_b | \mathcal{S} | \psi_a \rangle &= \langle \psi_a^* | \tilde{\mathcal{S}} | \psi_b^* \rangle = \langle \psi_a^* | \mathcal{V}^+ \mathcal{S} \mathcal{V} | \psi_b^* \rangle = \\ &= \langle \mathcal{V} \psi_a^* | \mathcal{S} | \mathcal{V} \psi_b^* \rangle = \langle \psi_{a^*} | S | \psi_{b^*} \rangle, \end{aligned} \quad (19.10)$$

где через  $\psi_{a^*}$  и  $\psi_{b^*}$ , обозначены «обращенные» волновые функции состояний  $a$  и  $b$ . Таким образом, выполняется равенство

$$S_{ba} = S_{a^* b^*}. \quad (19.11)$$

Соотношение (19.11) устанавливает связь между матричными элементами  $S$ -матрицы прямого и «обращенного» процесса. Состояния  $\psi_{a^*}$ ,  $\psi_{b^*}$  отличаются от состояний  $\psi_a$ ,  $\psi_b$  знаком таких величин, как скорости, импульсы, проекции момента количества движения, спина и т. д. Соотношение (19.11), или эквивалентное ему соотношение (19.10) носит название теоремы взаимности. На основании этой теоремы может быть установлена связь между сечениями прямых и обратных реакций (принцип детального равновесия).

Рассмотрим реакцию



Обозначим через  $j_a, m_a, j_A, m_A, j_b, m_b, j_B, m_B$  полные моменты и их проекции частиц, участвующих в реакции. Сечения прямой и

обратной реакции, выраженные через матричные элементы S-матрицы имеют вид

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b} = \frac{4\pi^2}{k_a^2} \left| \langle j_b, m_b, j_B, m_B; -\vec{n}_b | \mathcal{S} | j_a, m_a, j_A, m_A; \vec{n}_a \rangle \right|^2, \quad (19.12)$$

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a} = \frac{4\pi^2}{k_b^2} \left| \langle j_a, m_a, j_A, m_A; -\vec{n}_a | \mathcal{S} | j_b, m_b, j_B, m_B; \vec{n}_b \rangle \right|^2. \quad (19.13)$$

Так как вектор импульса относительного движения частиц в конечном состоянии направлен от центра тяжести, ему приписан знак минус. Непосредственно написать связь между этими сечениями нельзя, так как теорема взаимности связывает сечение прямого процесса и «обращенного», отличающегося от (19.13) изменением знаков проекций моментов  $m_a, m_A, m_b, m_B$  на обратные. Можно, однако, написать связь между усредненными сечениями, т. е. сечениями, просуммированными по проекциям моментов конечных состояний и усредненными по проекциям моментов начальных состояний. Такие сечения уже не зависят от проекций моментов и для них теорема взаимности (98,11) дает

$$\frac{1}{k_b^2} (2j_a + 1)(2j_A + 1) \frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b} = \frac{1}{k_a^2} (2j_b + 1)(2j_B + 1) \frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}, \quad (19.14)$$

где

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b} = \frac{1}{(2j_a + 1)(2j_A + 1)} \sum_{\substack{m_a, m_A, \\ m_b, m_B}} \frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b} \quad (19.15)$$

и

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a} = \frac{1}{(2j_b + 1)(2j_B + 1)} \sum_{\substack{m_a, m_A, \\ m_b, m_B}} \frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}. \quad (19.16)$$

Соотношение, аналогичное (19.14), можно написать и для полных сечений

$$\frac{1}{k_b^2} (2j_a + 1)(2j_A + 1) \bar{\sigma}_{ba} = \frac{1}{k_a^2} (2j_b + 1)(2j_B + 1) \bar{\sigma}_{ab}, \quad (19.17)$$

Отметим, что в рамках применимости теории возмущений можно установить связь и между неусредненными сечениями прямых и обратных реакций

$$\frac{1}{k_b^2} \frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b} = \frac{1}{k_a^2} \frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}. \quad (19.18)$$

Действительно, в этом случае вероятность перехода, а следовательно, и эффективное сечение процесса определяются квадратом модуля матричного элемента гамильтониана возмущения  $H'_{ba}$ , для которого в силу эрмитовости выполняется соотношение  $|H'_{ba}|^2 = |H'_{ab}|^2$ . Из этого равенства следует соотношение (19.18).