

5438

ЭКЗ. ЧИТ. ЗАГ

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна



P4 - 5438

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

И.А. Еганова , М.И. Широков

РАССЕЯНИЕ НА ДВУХ ЦЕНТРАХ
В ДЛИННОВОЛНОВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

1970

Сце.

P4 - 5438

И.А. Еганова*, М.И. Широков

**РАССЕЯНИЕ НА ДВУХ ЦЕНТРАХ
В ДЛИННОВОЛНОВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ**

Направлено в ЖЭТФ

* Физический институт АН АзССР.

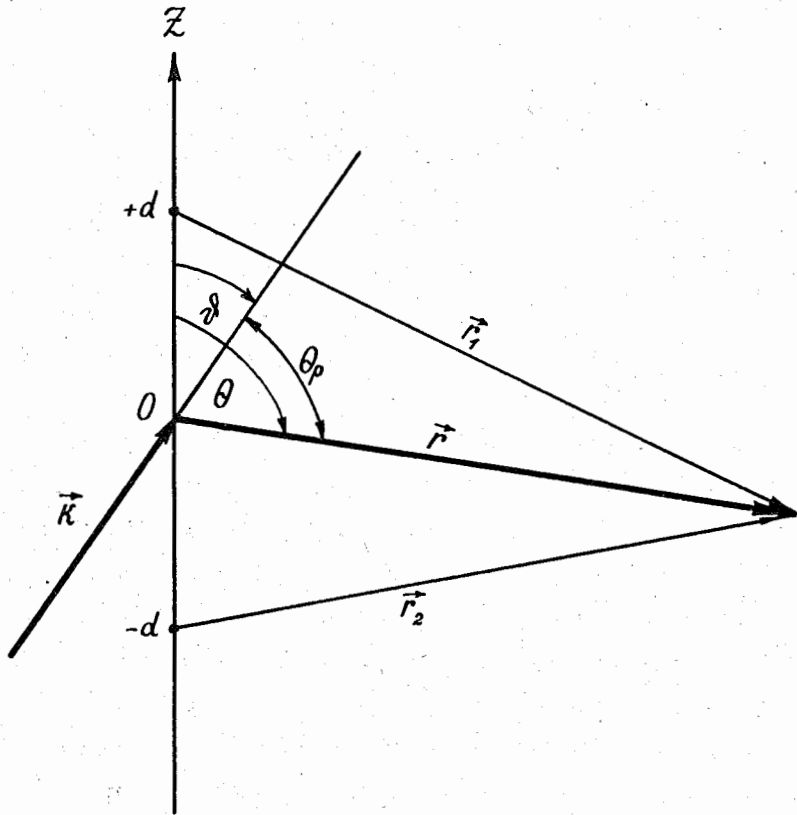
§1. В в е д е н и е

В молекулярной и ядерной физике существует много задач, в которых рассеивающая система состоит из нескольких центров, в простейшем случае из двух. Рядом авторов были развиты различные приближенные методы для решения этих задач (обзор их имеется в книге Н. Мотта и Г. Мессии ^{/1/}, гл. 8, §3).

Рассмотрим рассеяние бесспиновой частицы с волновым числом k в поле двух силовых центров, расположенных на расстоянии $R = 2d$ друг от друга (см. рисунок). Речь пойдет о сферически-симметричных потенциалах с малым радиусом действия b . При условии, что $R \gg b$ и $kR \gg 1$, такую задачу решают приближенно путем сведения к задаче последовательного многократного рассеяния на каждом центре в отдельности ^{x/}, см. статью К. Бракнера ^{/2/}, а также п.2 §3, гл. 8 в книге ^{/1/}.

В предлагаемой работе задача рассеяния на двух центрах решается с помощью двухточечных функций, построенных в работе ^{/3/}. Полу-

^{x/}Напомним, что в приближении многократного рассеяния на каждый рассеивающий центр падает не только волна $e^{i\vec{k}\vec{r}}$, идущая из бесконечности (так называемое однократное рассеяние), но также волна, претерпевшая рассеяние на другом центре. В случае двукратного рассеяния предполагается, что на каждом центре волна, рассеянная другим центром, рассеивается только один раз. Соответствующая амплитуда рассеяния $\approx (2kd)^{-1}$.



φ и θ - углы между осью $Z \parallel 2\vec{d}$ и направлениями соответственно падающей \vec{k} и рассеянной \vec{r} волны.

ченная формула для амплитуды рассеяния является точной в предельном случае $b \rightarrow 0$. Сравнение с аналогичной формулой приближения многократного рассеяния (см. п.2 в работе ^{/2/}) показывает, что если фазы рассеяния на потенциалах малы, то выражение Бракнера для амплитуды рассеяния справедливо даже без требования $kR \gg 1$ (см. §2, п.3). Возможность физических применений полученных формул обсуждается в §3.

§2. Описание рассеяния на двух центрах с помощью двухточечных функций

1. Известно, что рассеяние частицы с импульсом $\hbar \vec{k}$ на одном центре достаточно хорошо описывается одной S-волной при условии, что $kb \ll 1$. Математическая причина возможности такого описания кроется в том, что собственные функции оператора квадрата импульса с определенным орбитальным моментом — так называемые сферические функции Бесселя $j_\ell(kr)$ — все обращаются в нуль в точке $kr=0$, кроме одной функции, соответствующей S-волне ($\ell=0$). В работе ^{/3/} были построены такие собственные функции оператора квадрата импульса, которые обладают аналогичным свойством по отношению к двум выделенным центрам: в двух точках все они обращаются в нуль, за исключением первых двух (их назвали двухточечными). Знание двухточечных функций резко упрощает задачу нахождения собственных функций гамильтониана, описывающего рассеяние на двух центрах, расположенных в точках $(\pm \vec{d})$ (см. рисунок, ось Z проводим через рассеивающие центры):

$$H = -\frac{1}{2m} \vec{\nabla}^2 + U(|\vec{r}-\vec{d}|) + U(|\vec{r}+\vec{d}|), \quad (1)$$

если фигурирующие в (1) потенциалы имеют малый радиус действия b . Действительно, собственными функциями H , обозначим их через $\psi_{k\Lambda M}(\vec{r})$,

$$H \psi_{k\Lambda M}(\vec{r}) = \frac{k^2}{2m} \psi_{k\Lambda M}(\vec{r}), \quad (2)$$

будут все двухточечные функции, кроме первых двух, F_{k10} и F_{k20} , т.к. все они обращаются в нуль там, где потенциалы отличны от нуля. Оставшиеся собственные функции ψ_{k10} и ψ_{k20} , которые и описывают рассеяние, могут быть построены как суперпозиции функций F_{k10} и F_{k20} :

$$\psi_{k\Lambda 0}(\vec{r}) = \int_0^\infty dk' \sum_{\Lambda'=1}^2 X_{\Lambda\Lambda'}(k, k') F_{k'\Lambda'0}(\vec{r}), \quad \Lambda = 1, 2, \quad (3)$$

поскольку двухточечные функции образуют полную систему нормированных функций. Условие успеха такого описания такое же, как и в случае одного центра: $kb \ll 1$.

2. Общее решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1), соответствующее состоянию с энергией $\frac{k^2}{2m}$, имеет вид:

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\Lambda, M} a_{\Lambda M}(k) \psi_{k\Lambda M}(\vec{r}). \quad (4)$$

Если мы хотим, чтобы оно описывало процесс рассеяния, коэффициенты $a_{\Lambda M}(k)$ должны быть определены таким образом, чтобы при вычитании из $\psi_k(\vec{r})$ падающей плоской волны $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ получалось выражение, представляющее на больших расстояниях одну только расходящуюся волну:

$$\sum_{\Lambda, M} a_{\Lambda M}(k) \psi_{k\Lambda M}(\vec{r}) - e^{i\vec{k}\vec{r}} = f \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}, \quad r \gg 2d. \quad (5)$$

Разложив плоскую волну в (5) по двухточечным функциям:

где

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{\Lambda, M} \left\{ \int_0^\infty dk' c_{k'\Lambda M}(\vec{k}) F_{k'\Lambda M}(\vec{r}) \right\} \equiv \sum_{\Lambda, M} e_{k\Lambda M}(\vec{r}), \quad (6)$$

$$c_{k'\Lambda M}(\vec{k}) = (k')^2 \int d\vec{r}' e^{i\vec{k}\vec{r}'} F_{k'\Lambda M}(\vec{r}'), \quad (7)$$

получаем следующее уравнение для a_{10} и a_{20} :

$$a_{10}(k) \psi_{k10}(\vec{r}) + a_{20}(k) \psi_{k20}(\vec{r}) - e_{k10}(\vec{r}) - e_{k20}(\vec{r}) = f \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}, \quad r \gg 2d. \quad (8)$$

Функции $\psi_{k\Lambda 0}(\vec{r})$ и $e_{k\Lambda 0}(\vec{r})$ в области $r \gg 2d$ получены в приложениях (см. (А.10) и (Б.13)). Подставив последние в (8), получим, что

$$a_{10}(k) = b_{10}(k) \frac{2\pi \cos \alpha}{A_{k1} \gamma_+}, \quad a_{20}(k) = b_{20}(k) \frac{2\pi i \sin \alpha}{A_{k2} \gamma_-},$$

где для сокращения записи введены обозначения:

$$\alpha = (\vec{k}d) \equiv kd \cos \vartheta, \quad (9)$$

$$\gamma_{\pm} = \sqrt{1 \pm \sin 2kd / 2kd}, \quad (10)$$

а $b_{10}(k)$ и $b_{20}(k)$ удовлетворяют уравнению

$$i \cos \alpha \cos \beta \gamma_+^{-2} \frac{1}{kr} [e^{i\vec{k}\vec{r}} (1 - b_{10}(k) e^{i\delta_1}) - e^{-i\vec{k}\vec{r}} (1 - b_{10}(k) e^{-i\delta_1})] + \\ + i \sin \alpha \sin \beta \gamma_-^{-2} \frac{1}{kr} [e^{i\vec{k}\vec{r}} (1 - b_{20}(k) e^{i\delta_2}) + e^{-i\vec{k}\vec{r}} (1 - b_{20}(k) e^{-i\delta_2})] = f \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}. \quad (11)$$

В (11) введено обозначение

$$\beta = kd \cos \theta \quad (12)$$

(угол θ показан на рисунке).

Величины δ_1 и δ_2 (см. (A.10) в приложении А) будем называть двухточечными фазами (по аналогии с фазой S-рассеяния δ в задаче одного центра). Они определяются конкретным видом рассеивающих потенциалов (уравнение для δ_Λ приведено в приложении В, см. (B.1)); они равны нулю, если нет взаимодействия.

Учитывая в (11), что левая часть не должна содержать сходящуюся волну e^{ikr} при любых r, ϑ и θ , находим, что $b_{10} = e^{i\delta_1}$ и $b_{20} = e^{i\delta_2}$; подставив эти формулы в (11), получаем для амплитуды рассеяния f :

$$f(\theta, \vartheta) = \frac{2}{k} \{ \sin \delta_1 e^{i\delta_1} \gamma_+^{-2} \cos \alpha \cos \beta + \sin \delta_2 e^{i\delta_2} \gamma_-^{-2} \sin \alpha \sin \beta \}. \quad (13)$$

Формула (13) выражает амплитуду рассеяния на двух центрах всего через две фазы, δ_1 и δ_2 , и может быть предложена для фазового анализа ^{x/}. Однако, если фаза S-рассеяния на одном центре δ мала, оказывается, что амплитуда $f(\theta, \vartheta)$ в основном является простой суперпозицией амплитуд однократного и двукратного рассеяния на каждом центре в отдельности и определяется одной фазой δ . Покажем это.

3. Приближение многократного рассеяния в случае малых фаз δ дает следующее выражение для амплитуды рассеяния (см. формулу (3) в работе Бракнера ^{/2/} или (8.112) в книге ^{/1/}):

$$f_{Br}(\theta, \vartheta) = 2\eta \cos(\alpha - \beta) + \eta^2 \frac{e^{i2kd}}{d} \cos(\alpha + \beta), \quad \eta = \frac{1}{k} \sin \delta e^{i\delta}, \quad (14)$$

^{x/} При $d \rightarrow 0$ двухточечная функция $F_{k20}(\vec{r}) \rightarrow i_1(kr) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$, фаза δ_2 становится много меньше δ_1 и амплитуда $f(\theta, \vartheta)$ переходит в амплитуду $\frac{1}{k} \sin \delta_1 e^{i\delta_1}$ S-рассеяния на одном центре.

η и δ - амплитуда и фаза S -рассеяния на одном центре. Напомним, что формула (14) была получена в ^{/2/} при условиях: $b \ll 2d$ и $2kd \gg 1$.

С другой стороны, используем в (13) разложение $\exp i\delta_{\Lambda} \approx 1 + i\delta_{\Lambda}$ и формулу

$$\delta_{\Lambda} \approx \delta (1 + \text{Const}(b/d)^2) (1 \pm \delta \frac{\cos 2kd}{2kd}) \gamma_{\pm}^2 \quad (15)$$

(верхний знак в (15) соответствует $\Lambda = 1$, нижний - $\Lambda = 2$), справедливые в случае малых фаз δ и при $b < d$. Получение (15) описано в приложении В; формула (15) годится для случая, когда в двух центрах действуют одинаковые потенциалы U . В случае $b \ll 2d$ мы получим для $f(\theta, \vartheta)$ то же самое выражение (14), но при этом нигде не потребовав, чтобы $2kd$ было $\gg 1$. Формула Бракнера оказывается, таким образом, верной и в области малых $2kd$, что никак не следует из способа ее получения, т.к. именно условие $2kd \gg 1$ позволило определить амплитуду волны в окрестности второго центра после рассеяния на первом (см. (8.105) в книге ^{/1/}). В случае, когда $2d > b$, но сравнимо с b , из (13) и (15) следует, что амплитуда $f(\theta, \vartheta)$ будет описываться формулой, которая будет отличаться от формулы Бракнера тем, что вместо δ (фазы S -рассеяния на одном потенциале) в ней будет фигурировать величина $\delta(1 + \text{Const}(b/d)^2)$.

4. Обсудим качественные особенности углового распределения, описываемого формулами (13) или (14). Сразу заметим, что если $\vartheta \neq \pi/2$, в пространстве не будет таких направлений, в которых интенсивность равнялась бы нулю, т.к. дифференциальное эффективное сечение - существенно положительная величина:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = a^2 + b^2 - 2ab \cos(\delta_1 - \delta_2),$$

$$a = \frac{2 \sin \delta_1}{k \gamma_+} \cos \alpha \cos \beta, \quad b = \frac{2 \sin \delta_2}{k \gamma_-} \sin \alpha \sin \beta. \quad (16)$$

Перейдем к случаю малых фаз рассеяния δ . Пусть угол ϑ фиксирован. Тогда, подставив (15) в (16), найдя максимум для $d\sigma/d\Omega$, получим, что направления максимальной интенсивности определяются такими θ , которые удовлетворяют условию

$$2kd(\cos \theta - \cos \vartheta + 2\epsilon) = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N; \quad (17)$$

где

$$\epsilon = \delta \frac{\cos 2kd}{2kd} \sin 2\alpha.$$

Условие (17) является некоторым обобщением известного условия максимумов при рассеянии на цепочке центров, которое получается путем простого подсчета разности оптических путей:

$$2kd(\cos \theta - \cos \vartheta) = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (18)$$

Условие (17) учитывает бракнеровскую поправку к однократному рассеянию.

5. В заключение приведем без вывода формулу для дифференциального эффективного сечения (16), усредненного по всем направлениям вектора $\vec{R} = 2\vec{d}$:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = & \frac{1}{k^2} \left\{ \frac{\sin^2 \delta_1}{\gamma_+^2} \left[1 + \frac{\sin x}{2x} + \frac{\sin y}{2y} + \frac{\sin 2kd}{2kd} \right] + \right. \\
 & + \frac{\sin^2 \delta_2}{\gamma_-^2} \left[1 + \frac{\sin x}{2x} + \frac{\sin y}{2y} - \frac{\sin 2kd}{2kd} \right] + \\
 & \left. + \frac{\sin \delta_1 \cdot \sin \delta_2}{\gamma_+ \gamma_-} \cos(\delta_1 - \delta_2) \left[\frac{\sin x}{x} - \frac{\sin y}{y} \right] \right\}, \quad (19)
 \end{aligned}$$

$x = 4kd \sin(\Theta_p/2)$, $y = 4kd \cos(\Theta_p/2)$, Θ_p - угол рассеяния

(см. рисунок).

§3. З а к л ю ч е н и е

Основной результат работы имеет методическое значение и заключается в том, что наше точное решение задачи позволяет в случае малых фаз δ , во-первых, подтвердить справедливость приближенного метода многократного рассеяния и, во-вторых, расширить фактические границы применимости формулы Бракнера. Обсудим возможные физические применения этого точного решения задачи рассеяния на двух потенциалах. Во всех приложениях должны быть выполнены два условия: 1) эффективный радиус действия потенциала отдельного центра b должен быть настолько мал, чтобы $kb \ll 1$, и 2) расстояние между центрами должно быть фиксированным. Рассмотрим, например, рассеяние медленных нейтронов $x/$ на двухатомных молекулах O_2 , N_2 и т.п. Первое ус-
 x/Т.к. формулы (16) и (19) описывают рассеяние бесспиновых частиц, то лучше было бы говорить о рассеянии мезонов.

ловие выполняется, однако расстояние между атомами молекул только приближенно описывается некоторой средней величиной R . Экспериментальные данные ^{/6/} в основном описываются уже простой суперпозицией амплитуд однократного рассеяния, усредненной по всем направлениям вектора \vec{R} . Наблюдающиеся отклонения от эксперимента вряд ли следует обсуждать на основе формулы (19), поскольку их можно приписать непостоянности величины R .

Приближение фиксированного расстояния гораздо лучше выполняется для кристаллов, нежели для молекул. Формулу (16) можно применить к рассеянию на линейной цепочке атомов (линейный кристаллит). На основании формулы (17) можно ожидать, что положения максимумов при $\vartheta \neq \frac{\pi}{2}$ будут слегка отличаться от положений, которые дает обычная формула (18). Смещение максимумов могло бы быть использовано измерения δ (фазы S -рассеяния на отдельном центре). Что касается трехмерных кристаллов, то в некоторых простых случаях (кубическая решетка, отражение от одной из естественных граней) можно показать, что условие (17) не дает никаких поправок к формуле Вульфа-Брэгга. Действительно, закон Вульфа-Брэгга в наших обозначениях имеет вид:

$$\theta = \pi - \vartheta, \quad 4kd \cos \vartheta = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N.$$

При этих условиях поправка $\epsilon = 0$.

В заключение один из авторов (И.Е.) благодарит И.В. Амирханова и Ю.А. Салганика за обсуждение вопросов, связанных с рассеянием на двух центрах.

Приложение А

Волновые функции, описывающие рассеяние на двух
центрах

1. Согласно (3) определение собственных функций гамильтониана $\psi_{k\Lambda 0}(\vec{r})$, $\Lambda = 1, 2$, сводится к нахождению коэффициентов разложения $X_{\Lambda\Lambda'}(k, k')$. Уравнение для них мы получим, подставив (3) в (2) и используя при этом ортонормированность двухточечных функций $F_{k\Lambda M}(\vec{r})$ (см. §2 в работе /3/):

$$(k^2 - k'^2) X_{\Lambda\Lambda'}(k, k') = 2m(k')^2 \int_0^\infty dk'' \sum_{\Lambda''} X_{\Lambda\Lambda''}(k, k'') \langle k''\Lambda''0 | V | k'\Lambda'0 \rangle, \quad (\text{A.1})$$

$$V(\vec{r}) = U(|\vec{r}-\vec{d}|) + U(|\vec{r}+\vec{d}|), \quad (\text{A.2})$$

$$\langle k''\Lambda''0 | V | k'\Lambda'0 \rangle \equiv \int d\vec{r} F_{k''\Lambda''0}(\vec{r}) V(\vec{r}) F_{k'\Lambda'0}(\vec{r}). \quad (\text{A.3})$$

Так как функция $F_{k_{10}}(r)$ - четная, а $F_{k_{20}}(r)$ - нечетная (см. (Б.8)), то для сферически-симметричных потенциалов U , когда $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$ (см. (A.2)), имеем: $\langle k''\Lambda''0 | V | k'\Lambda'0 \rangle = \delta_{\Lambda\Lambda''} \langle k''\Lambda'0 | V | k'\Lambda'0 \rangle$, и (A.1) сводится к уравнению

$$(k^2 - k'^2) X_{\Lambda\Lambda'}(k, k') = 2m(k')^2 \int_0^\infty dk'' X_{\Lambda\Lambda'}(k, k'') \langle k''\Lambda'0 | V | k'\Lambda'0 \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Уравнению (A.4) удовлетворяет "матрица" коэффициентов $X_{\Lambda\Lambda'}(k, k')$, диагональная по дискретному индексу Λ : $X_{\Lambda\Lambda'}(k, k') = \delta_{\Lambda\Lambda'} X_{\Lambda\Lambda}(k, k')$, где величина $X_{\Lambda\Lambda}(k, k')$ определяется уравнением

$$(k^2 - k'^2) X_{\Lambda\Lambda}(k, k') = 2m(k')^2 \int_0^\infty dk'' X_{\Lambda\Lambda}(k, k'') \langle k''\Lambda'0 | V | k'\Lambda'0 \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Таким образом,

$$\psi_{k\Lambda_0}(\vec{r}) = \int_0^\infty dk' X_\Lambda(k, k') F_{k'\Lambda_0}(\vec{r}), \quad \Lambda = 1, 2. \quad (\text{A.6})$$

Это означает, что собственные функции могут быть занумерованы тем же индексом Λ , что и двухточечные функции. Последнее верно только для потенциалов вида (A.2).

2. Для решения задачи рассеяния достаточно знать только явный вид собственных функций $\psi_{k10}(\vec{r})$ и $\psi_{k20}(\vec{r})$ на расстояниях $r \gg 2d$, т.е. вне области действия потенциалов. Известно, что в этой области собственные функции гамильтониана должны раскладываться не только по системе нормируемых функций $j_\ell(kr) Y_\ell^M(\Theta, \phi)$, но и по системе функций $n_\ell(kr) Y_\ell^M(\Theta, \phi)$, линейно независимых от $j_\ell(kr) Y_\ell^M(\Theta, \phi)$, см., например, §35 в книге /4/. У нас собственные функции нумеруются двухточечными индексами Λ и M . Поэтому, кроме системы двухточечных функций $F_{k\Lambda M}(\vec{r})$, получаемой некоторым унитарным преобразованием из системы $j_\ell(kr) Y_\ell^M(\Theta, \phi)$, введем другую систему, $G_{k\Lambda M}(\vec{r})$, получаемую из $n_\ell(kr) Y_\ell^M(\Theta, \phi)$ тем же унитарным преобразованием, так что $G_{k\Lambda M}(\vec{r})$ будут линейно независимы от $F_{k\Lambda M}(\vec{r})$:

$$F_{k\Lambda M}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} U_{\Lambda\ell}^M j_\ell(kr) Y_\ell^M(\Theta, \phi), \quad (\text{A.7})$$

$$G_{k\Lambda M}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} U_{\Lambda\ell}^M n_\ell(kr) Y_\ell^M(\Theta, \phi). \quad (\text{A.8})$$

В области $r \gg 2d$ собственные функции $\psi_{k\Lambda_0}(\vec{r})$, $\Lambda = 1, 2$, должны иметь вид ^{x/}:

^{x/} При написании (A.9) учли, что имеет место (A.8).

$$\psi_{k\Lambda_0}(\vec{r}) = a_{k\Lambda} F_{k\Lambda_0}(\vec{r}) + b_{k\Lambda} G_{k\Lambda_0}(\vec{r}), \quad (\text{A.9})$$

здесь $a_{k\Lambda}$ и $b_{k\Lambda}$ — константы, которые определяются граничными условиями и нормировкой $\psi_{k\Lambda_0}(\vec{r})$. Явный вид функций $F_{k\Lambda_0}(\vec{r})$ и $G_{k\Lambda_0}(\vec{r})$, $\Lambda=1,2$, получен в приложении Б. Подставим в (A.9) выражения (Б.10) и (Б.11) для $F_{k\Lambda_0}(\vec{r})$ и $G_{k\Lambda_0}(\vec{r})$, справедливые при $r \gg 2d$, и введем вместо констант $a_{k\Lambda}$ и $b_{k\Lambda}$ другие постоянные: $a_{k\Lambda} = A_{k\Lambda} \cos \delta_{\Lambda}(k)$, $b_{k\Lambda} = -A_{k\Lambda} \sin \delta_{\Lambda}(k)$. Получим при $r \gg 2d$:

$$\psi_{k10}(r) = \frac{A_{k1} \cos \beta}{\pi \gamma_+} \frac{\sin(kr + \delta_1)}{kr}, \quad \psi_{k20}(r) = -\frac{A_{k2} \sin \beta}{\pi \gamma_-} \frac{\cos(kr + \delta_2)}{kr}. \quad (\text{A.10})$$

β и γ определены формулами (12) и (10) соответственно.

Приложение Б

Вычисление функций F_{k10} , F_{k20} , G_{k10} и G_{k20}

Построение матрицы $U_{\Lambda \ell}^M$, встречающейся в (A.7) и (A.8), обсуждалось в работе /3/, где, в частности, было получено (см. (2.9) и (2.10) в /3/), что

$$U_{1\ell}^0 = \begin{cases} \sqrt{\pi(2\ell+1)} j_{\ell}(kd)/\gamma_+, & \ell - \text{четное}; \\ 0, & \ell - \text{нечетное}; \end{cases} \quad U_{2\ell}^0 = \begin{cases} 0, & \ell - \text{четное}; \\ \sqrt{\pi(2\ell+1)} j_{\ell}(kd)/\gamma_-, & \ell - \text{нечетное}; \end{cases} \quad (\text{Б.1})$$

В (Б.1) использовано обозначение (10). Подставив (Б.1) в (А.7) и (А.8), получаем для искомых функций:

$$F_{k10}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \gamma_+^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} {}'' (2\ell+1) j_{\ell}(kd) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (\text{Б.2})$$

$$F_{k20}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \gamma_-^{-1} \sum_{\ell=1}^{\infty} {}' (2\ell+1) j_{\ell}(kd) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta),$$

$$G_{k10}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \gamma_+^{-1} \sum_{\ell=0}^{\infty} {}'' (2\ell+1) j_{\ell}(kd) n_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (\text{Б.3})$$

$$G_{k20}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \gamma_-^{-1} \sum_{\ell=1}^{\infty} {}' (2\ell+1) j_{\ell}(kd) n_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta).$$

В (Б.2) и (Б.3) Σ' означает сумму по всем нечетным ℓ , Σ'' - по всем четным, θ - полярный угол вектора \vec{r} в системе координат, где ось $Z \parallel 2\vec{d}$ (см. рисунок).

Суммы в формулах (Б.2) и (Б.3) могут быть вычислены с помощью формул (8.533) в таблицах ^{/5/}. Складывая (8.533,1) и (8.533,2) и вычитая одну формулу из другой при $\phi = \theta$, получаем, что

$$\frac{2}{\pi} \frac{\cos k \frac{|\vec{r}-\vec{d}|}{k}}{k |\vec{r}-\vec{d}|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) j_{\ell}(kd) n_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (\text{Б.4})$$

$$\frac{2}{\pi} \frac{\sin k \frac{|\vec{r}-\vec{d}|}{k}}{k |\vec{r}-\vec{d}|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) j_{\ell}(kd) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta). \quad (\text{Б.5})$$

Чтобы найти суммы только по четным или только по нечетным ℓ , повторим ту же процедуру, но с $\phi = \pi - \theta$, тогда получим, что

$$\frac{2}{\pi} \frac{\cos k |\vec{r} + \vec{d}|}{k |\vec{r} + \vec{d}|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (-1)^{\ell} (2\ell+1) j_{\ell}(kd) n_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta), \quad (\text{Б.6})$$

$$\frac{2}{\pi} \frac{\sin k |\vec{r} + \vec{d}|}{k |\vec{r} + \vec{d}|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (-1)^{\ell} (2\ell+1) j_{\ell}(kd) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta). \quad (\text{Б.7})$$

Складывая затем (Б.4) и (Б.6) (соответственно (Б.5) и (Б.7)) и вычитая одну формулу из другой, получаем суммы, встречающиеся в (Б.2) и (Б.3).

Таким образом,

$$F_{k\Lambda 0}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \gamma_{\pm}^{-1} \left(\frac{\sin kr_1}{kr_1} \pm \frac{\sin kr_2}{kr_2} \right), \quad (\text{Б.8})$$

$$G_{k\Lambda 0}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \gamma_{\pm}^{-1} \left(\frac{\cos kr_1}{kr_1} \pm \frac{\cos kr_2}{kr_2} \right). \quad (\text{Б.9})$$

Здесь и везде в дальнейшем верхние знаки соответствуют $\Lambda=1$, нижние - $\Lambda=2$; $r_1 = |\vec{r} - \vec{d}|$, $r_2 = |\vec{r} + \vec{d}|$ (см. рисунок). Так как в области $r \gg 2d$ имеем $r_1 \approx r - d \cos \theta$, $r_2 \approx r + d \cos \theta$, получаем

$$F_{k10}(\vec{r}) \approx \frac{\cos \beta}{\pi \gamma_+} \frac{\sin kr}{kr}, \quad F_{k20}(\vec{r}) \approx -\frac{\sin \beta}{\pi \gamma_-} \frac{\cos kr}{kr}, \quad r \gg 2d; \quad (\text{Б.10})$$

$$G_{k10}(\vec{r}) \approx -\frac{\cos \beta}{\pi \gamma_+} \frac{\cos kr}{kr}, \quad G_{k20}(\vec{r}) \approx -\frac{\sin \beta}{\pi \gamma_-} \frac{\sin kr}{kr}, \quad r \gg 2d. \quad (\text{Б.11})$$

В (Б.10) и (Б.11) использовано обозначение $\beta = kd \cos \theta$.

В заключение рассмотрим разложение плоской волны по двухточечным функциям (6). Подставив (Б.8) в (7) и выполнив интегрирование, найдем, что

$$e_{k'\Lambda_0}(\vec{k}) = \pi (1 \pm \sin 2k'd |2k'd|)^{-1/2} (e^{i\vec{k}\vec{d}} \pm e^{-i\vec{k}\vec{d}}) \delta(k-k'), \Lambda=1,2. \quad (\text{Б.12})$$

Тогда, подставив (Б.12) в (6), получим для $e_{k\Lambda_0}(\vec{r})$:

$$e_{k_{10}}(\vec{r}) = \frac{2\pi \cos \alpha}{\gamma_+} F_{k_{10}}(\vec{r}), \quad e_{k_{20}}(\vec{r}) = \frac{2\pi i \sin \alpha}{\gamma_-} F_{k_{20}}(\vec{r});$$

и в области $r \gg 2d$ согласно (Б.10):

$$e_{k_{10}}(\vec{r}) \approx \frac{2\cos \alpha \cos \beta}{\gamma_+^2} \frac{\sin kr}{kr}, \quad e_{k_{20}}(\vec{r}) \approx -\frac{2i \sin \alpha \sin \beta}{\gamma_-^2} \frac{\cos kr}{kr}, \quad (\text{Б.13})$$

$r \gg 2d;$

в последних формулах использовано обозначение (9).

Приложение В

Двухточечные фазы δ_1 и δ_2

1. Точно так же, как выводится уравнение для фаз в случае рассеяния на одном центре (см., например, вывод (98.21) в книге ^{14/}), для двухточечных фаз получается следующее уравнение:

$$-\frac{1}{\pi k m} \sin \delta_{\Lambda} = \int_{V_0} d\vec{r} V(\vec{r}) F_{k\Lambda_0}(\vec{r}) \psi_{k\Lambda_0}(\vec{r}), \quad \Lambda=1,2. \quad (\text{В.1})$$

V_0 - некоторый объем достаточно большого радиуса $\rho \gg d$. Будем решать (В.1) с помощью метода теории возмущений. В качестве нулевого приближения для $\psi_{k\Lambda_0}(\vec{r})$ можно взять $F_{k\Lambda_0}(\vec{r})$. Это означает, что нулевое приближение для $X_{\Lambda}(k,k')$ равно $\delta(k-k')$, см. (А.6). Тогда следующее приближение имеет вид, см. (А.5):

$$X_{\Lambda}^{(1)}(k, k') = 2mP \frac{k'^2 \langle k\Lambda 0 | V | k'\Lambda 0 \rangle}{k^2 - k'^2}, \quad \Lambda = 1, 2,$$

где P означает главное значение.

Таким образом, если ограничиться первым приближением, то

$$\psi_{k\Lambda 0}(r) \approx \psi_{k\Lambda 0}^{(0)}(r) + \psi_{k\Lambda 0}^{(1)}(r) = F_{k\Lambda 0}(r) + 2mP \int_0^{\infty} dk' \frac{k' \langle k\Lambda 0 | V | k'\Lambda 0 \rangle}{k^2 - k'^2} F_{k'\Lambda 0}(r). \quad (B.2)$$

Подставив (B.2) в (B.1), получим, что в рассматриваемом приближении

$$-\frac{1}{\pi k m} \sin \delta_{\Lambda} = \langle k\Lambda 0 | V | k\Lambda 0 \rangle + 2mP \int_0^{\infty} dk' \frac{k' \langle k\Lambda 0 | V | k'\Lambda 0 \rangle^2}{k^2 - k'^2}, \quad \Lambda = 1, 2. \quad (B.3)$$

2. Вычислим $\langle k\Lambda 0 | V | k'\Lambda 0 \rangle$

Подставив в определение (A.3) явный вид двухточечных функций из (B.8), получаем, что

$$\langle k\Lambda 0 | V | k'\Lambda 0 \rangle = \frac{1}{4\pi^2} \gamma_{\pm}^{-1}(k) \gamma_{\pm}^{-1}(k') \int d\vec{r} V(\vec{r}) \left(\frac{\sin kr_1}{kr_1} \pm \frac{\sin kr_2}{kr_2} \right) \left(\frac{\sin k'r_1}{k'r_1} \pm \frac{\sin k'r_2}{k'r_2} \right).$$

$\gamma_{\pm}(k)$ определены формулой (10). Рассмотрим интегралы, встречающиеся в правой части (B.4).

$$\begin{aligned} \text{а) Согласно (A.2) } i_1 &= \int d\vec{r} V(\vec{r}) \frac{\sin kr_1}{kr_1} \cdot \frac{\sin k'r_2}{k'r_2} = \\ &= \int d\vec{r} U(\vec{r}_1) \frac{\sin kr_1}{kr_1} \cdot \frac{\sin k'r_2}{k'r_2} + \int d\vec{r} U(\vec{r}_2) \frac{\sin k'r_2}{k'r_2} \cdot \frac{\sin kr_1}{kr_1}. \end{aligned}$$

Переходя в первом интеграле от интегрирования по $d\vec{r}$ к интегрированию по $d\vec{r}_1$, а во втором - по $d\vec{r}_2$, воспользовавшись затем

в первом формулой (Б.7), а во втором - (Б.5) и проинтегрировав по углам, получим

$$i_1 = 4\pi \left(\frac{\sin 2kd}{2kd} + \frac{\sin 2k'd}{2k'd} \right) \int_0^b dr r^2 U(r) \frac{\sin kr}{kr} \cdot \frac{\sin k'r}{k'r} \quad (\text{Б.5})$$

Так как (Б.5) симметрично относительно k и k' , то

$$i_2 = \int d\vec{r} V(\vec{r}) \frac{\sin k'r_1}{k'r_1} \cdot \frac{\sin kr_2}{kr_2} = i_1 \quad (\text{Б.6})$$

б) Интегралы $I_\Lambda = \int d\vec{r} V(\vec{r}) \frac{\sin kr_\Lambda}{kr_\Lambda} \cdot \frac{\sin k'r_\Lambda}{k'r_\Lambda}$, $\Lambda=1,2$ вычисляются точно таким же образом, что и i_1 . Приведем результат:

$$I_\Lambda = 4\pi \left[1 + \frac{\sin 2kd}{2kd} \cdot \frac{\sin 2k'd}{2k'd} \right] \int_0^b dr r^2 U(r) \frac{\sin kr}{kr} \cdot \frac{\sin k'r}{k'r} +$$

$$+ \pi^3 \sum_{\ell=1}^{\infty} (2\ell+1) j_\ell(2kd) j_\ell(2k'd) \int_0^b dr r^2 U(r) j_\ell(kr) j_\ell(k'r) = \quad (\text{Б.7})$$

$$= 4\pi \left[1 + \frac{\sin 2kd}{2kd} \cdot \frac{\sin 2k'd}{2k'd} + \text{const} (b/d)^2 \right] \int_0^b dr r^2 U(r) \frac{\sin kr}{kr} \cdot \frac{\sin k'r}{k'r}.$$

В (Б.7) учтено, что члены суммы по ℓ быстро убывают, т.к. $kb \ll 1$; при этом первый ($\ell=1$) и самый большой член меньше $\frac{1}{3d^2} \int_0^b dr U(r) r^4$. Для "прямоугольного" потенциала ($U(r) = U_0$ при $r \leq b$) const в (Б.7) $\approx \frac{\pi}{10} k k' d^2 j_1(2kd) j_1(2k'd) < \frac{1}{5}$. Подставив (Б.5) - (Б.7) в (Б.4), получим, наконец:

$$\langle k\Lambda 0 | V | k'\Lambda 0 \rangle = \frac{2}{\pi} \gamma_{\pm}(k) \gamma_{\pm}(k') \int_0^b dr r^2 U(r) \frac{\sin kr}{kr} \frac{\sin k'r}{k'r} \times (1 + \text{Const}(b/d)^2) \quad (\text{Б.8})$$

в формуле (В.8) в случае "прямоугольного" потенциала $\text{Const} < 3$. Заметим, что когда $k=k'$, интеграл, встречающийся в правой части (В.8), известен в задаче рассеяния на одном сферически-симметричном потенциале U , расположенном в начале координат (см., например, (98.22) в книге ^{/4/}):

$$\int_0^b dr r^2 U(r) \left(\frac{\sin kr}{kr} \right)^2 = - \frac{\sin \delta^{(0)}}{2mk}, \quad (\text{В.9})$$

где $\delta^{(0)}$ - фаза S -рассеяния в нулевом приближении.

Посмотрим теперь, при каком условии первое приближение для $\psi_{k\Lambda 0}$ будет достаточно хорошим. Подставив (В.8) в (В.2), проведя интегрирование по dk' , получим явный вид $\psi_{k\Lambda 0}(r)$, $\Lambda = 1, 2$, в первом приближении. Сравнив полученную формулу в области $r \gg 2d$ с точной формулой (А.10), увидим, что они совпадают, если

$$|\pi mk \langle k\Lambda 0 | V | k\Lambda 0 \rangle| \ll 1 \quad (\text{В.10})$$

(ср. получение (В.10) с нахождением условия применимости формулы Борна в книге ^{/1/}, гл. 16, §5). Ввиду (А.2) и (В.9), это условие означает, что $\sin \delta^{(0)}$ должен быть мал. В этом случае $\delta^{(0)}$ близко к точной фазе δ и $\sin \delta^{(0)} \approx \delta^{(0)}$ (см. (2.27) в книге ^{/1/}). Таким образом,

$$\langle k\Lambda 0 | V | k\Lambda 0 \rangle \cong - \frac{\delta^{(0)}}{\pi mk} (1 + \text{Const}(b/d)^2) \gamma_{\pm}^2. \quad (\text{В.11})$$

3. Вычислим $J_{\Lambda}(k) = P \int_0^{\infty} dk' k'^2 \frac{\langle k\Lambda 0 | V | k'\Lambda 0 \rangle}{k^2 - k'^2}$.

Используя (В.8), получаем, что

$$J_{\Lambda}(k) \cong (2\gamma_{\pm} / \pi k)^2 (1 + \text{Const}(b/d)^2) \int_0^b dr \int_0^b dr' U(r)U(r') \sin kr \sin kr' \times \\ \times P \int_0^{\infty} dk' \frac{\sin k'r \sin k'r'}{k^2 - k'^2} \left(1 \pm \frac{\sin 2k'd}{2k'd}\right).$$

Интеграл в смысле главного значения можно свести к табличным интегралам (см. (3.723,9) и (3.725,2) в таблицах^{/5/}), в результате в случае $d > b$ получаем:

$$J_{\Lambda}(k) \cong -2\gamma_{\pm}^2 / \pi k^3 (1 + \text{Const}(b/d)^2) \int_0^b dr \int_0^b dr' U(r)U(r') \sin kr \sin kr' \times \\ \times \left[\pm \sin kr \sin kr' \frac{\cos 2kd}{2kd} + \sin kr \cos kr' \theta(r-r) + \sin kr' \cos kr \theta(r-r') \right],$$

или, используя (B.9),

$$J_{\Lambda}(k) \cong -\gamma_{\pm}^2 (1 + \text{Const}(b/d)^2) \left\{ \pm \frac{(\delta^{(0)})^2}{2\pi m^2 k} - \frac{\cos 2kd}{2kd} + \right. \\ \left. + \frac{2}{\pi k^3} \int_0^b dr \int_0^r dr' U(r)U(r') \sin^2 kr' \sin 2kr \right\}.$$

Последний двойной интеграл тоже может быть выражен через фазу δ задачи одного центра. Для этого надо только рассмотреть следующее приближение для δ : $\delta \cong \delta^{(0)} + \delta^{(1)}$. Приведем только результат:

$$\int_0^b dr \int_0^r dr' U(r)U(r') \sin^2 kr' \sin 2kr = \frac{k^2}{4m^2} [\delta^{(0)} + \delta^{(1)} - \delta^{(0)}] = \frac{k^2}{4m^2} \delta^{(1)}.$$

При наличии условия (B.10) $\delta^{(1)} \ll \delta^{(0)}$. Таким образом, пренебрегая $\delta^{(1)}$ по сравнению с $\delta^{(0)}$, получаем

$$J_{\Lambda}(k) \approx \frac{(\delta^{(0)})^2}{2\pi m^2 k} \gamma_{\pm}^2 (1 + \text{Const} (b/d)^2) \frac{\cos 2kd}{2kd}. \quad (\text{B.12})$$

4. Теперь вернемся к выражению (B.3) для $\sin \delta_{\Lambda}$. Подставим в него (B.11) и (B.12):

$$\sin \delta_{\Lambda} \approx \delta^{(0)} (1 + \text{Const} (b/d)^2) (1 \pm \delta^{(0)} \frac{\cos 2kd}{2kd}) \gamma_{\pm}^2. \quad (\text{B.13})$$

Поскольку $\sin \delta_{\Lambda}$ мал, то $\sin \delta_{\Lambda} \approx \delta_{\Lambda}$ и (B.13) можно переписать в виде (15).

Л и т е р а т у р а

1. Н. Мотт, Г. Месси. Теория атомных столкновений. "Мир", Москва, 1969.
2. K.A. Brueckner. Phys.Rev., 89, 834 (1953).
3. I.A. Jeganova, M.I. Shirokov. Annalen der Physik, 21, 225 (1968).
4. А.С. Давыдов. Квантовая механика. ГИФМЛ, Москва, 1963.
5. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. ГИФМЛ, Москва, 1963.
6. N.Z. Alcock and D.G. Hurst. Phys.Rev., 75, 1609 (1949);
83, 1100 (1951).

Рукопись поступила в издательский отдел
28 октября 1970 года.