

А. И. БАЗЬ, Я. Б. ЗЕЛЬДОВИЧ, А. М. ПЕРЕЛОМОВ

Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике

Издание второе,
исправленное и дополненное



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
Москва 1971

Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М., изд. 2-е, перераб., монография, Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», 1971.

Книга посвящена вопросам квантовой механики, связанным с ее приложениями к атомным и ядерным процессам. По характеру изложения книга заполняет разрыв между учебниками и оригинальной литературой. Наряду с конкретными задачами рассматриваются современные общие методы, на примере нерелятивистской теории разъясняется понятие перенормировки, важное для теории элементарных частиц. Подробно рассмотрены следующие вопросы.

Свойства систем с малой энергией связи. Системы со случайным вырождением — атом водорода, трехмерный гармонический осциллятор. Аналитические свойства волновой функции и матрицы рассеяния. Функция Грина уравнения Шредингера. Точное решение задачи об осцилляторе с переменной частотой под действием внешней силы. Квазиклассические свойства вырожденного ферми-газа. Многомерная квазиклассика, квазиклассическое приближение в нестационарном случае. Свойства нестабильных систем. Свойства многоканальных систем. Пороговые явления. Описание системы из трех тел с помощью уравнений Фаддеева. Изучение теории перенормировок на примере нерелятивистской модели Ли.

*Альфред Иванович Базь,
Яков Борисович Зельдович,
Аскольд Михайлович Переломов*

Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике
М., 1971 г., 544 стр. с илл.

Редактор *В. В. Караваев*
Техн. редактор *В. Н. Кондакова*
Корректоры *О. А. Сигал, Н. Б. Румянцева*

Сдано в набор 2/XI 1970 г. Подписано к печати 5/IV 1971 г. Бумага 84X108¹/₃₂.
Физ. печ. л. 17. Условн. печ. л. 28,56. Уч.-изд. л. 27,97. Тираж 6500 экз.
Т-06511. Цена книги 1 р. 97 к. Заказ № 851.

Издательство «Наука»
Главная редакция физико-математической литературы
Москва, В-71, Ленинский проспект, 15.

Ордена Трудового Красного Знамени Ленинградская типография № 2
имени Евгении Соколовой Главполиграфпрома Комитета по печати при
Совете Министров СССР. Измайловский проспект, 29.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие ко второму изданию	6
Глава I. Дискретный спектр	9
§ 1. Введение	9
§ 2. Состояния с малой энергией связи	18
§ 3. Точечное взаимодействие и эквивалентность его граничному условию	26
§ 4. Частица в поле нескольких точечных потенциалов	30
§ 5. Кулоновский потенциал	34
§ 6. Трехмерный осциллятор	44
§ 7. Теорема вириала и ее обобщение	59
§ 8. Одинаковые частицы и статистическая физика	63
Глава II. Непрерывный спектр	67
§ 1. Введение. Волновые функции непрерывного спектра с $l = 0$	67
§ 2. Движение с орбитальным моментом $l \neq 0$; движение в кулоновском поле	76
§ 3. Волновые функции непрерывного спектра. Сечение рассеяния	85
§ 4. Оптическая теорема и ее обобщение	93
Глава III. Аналитические свойства волновой функции	98
§ 1. S-матрица и ее аналитические свойства	98
§ 2. «Ложные» полюса	110
§ 3. Свойства вычетов величины $S_l(k)$	115
§ 4. Дисперсионные соотношения	122
Глава IV. Функция Грина и теория возмущений	130
§ 1. Введение. Функция Грина радиального уравнения Шредингера	130
§ 2. Регулярный метод получения функции Грина	136
§ 3. Некоторые свойства функции Грина	143
§ 4. Функция Грина для нескольких свободных частиц	146
§ 5. Теория возмущений. Координатное представление	149
§ 6. Импульсное представление	155
§ 7. Функция Грина в импульсном представлении. Операторная алгебра	163

§ 8. Оператор рассеяния	169
§ 9. Формулы для точечных потенциалов	175
§ 10. Теория возмущений в непрерывном спектре	181
§ 11. Сходимость ряда теории возмущений	186
§ 12. Временная функция Грина	194
Глава V. Квазиклассическое приближение	198
§ 1. Волновая функция в квазиклассическом приближении	198
§ 2. Квазиклассическое приближение для вырожденного ферми-газа	204
§ 3. Многомерный случай	211
§ 4. Нестационарные задачи	224
Глава VI. Точные решения нестационарных задач для осциллятора	240
§ 1. Введение. Волновая функция осциллятора с переменной частотой под действием внешней силы	240
§ 2. Квантовый осциллятор под действием внешней силы. Вероятности перехода	245
§ 3. Параметрическое возбуждение квантового осциллятора	248
§ 4. Осциллятор с переменной частотой под действием внешней силы, вероятности перехода	256
§ 5. Квантовый осциллятор и адиабатические инварианты	260
§ 6. Квазиэнергия системы, подвергающейся периодическому воздействию	266
§ 7. Гейзенберговское представление и канонические преобразования	273
Глава VII. Квазистационарные состояния	288
§ 1. Введение. Теория Гамова	288
§ 2. Волновые функции	297
§ 3. Пример квазистационарного состояния	302
§ 4. Распад квазистационарного состояния	308
§ 5. Закон радиоактивного распада	315
§ 6. Обобщение нормировки и теория возмущений для квазистационарных состояний	320
§ 7. Асимптотика волновой функции при $r \rightarrow \infty$ и $t \rightarrow \infty$	324
§ 8. Рождение нестабильной частицы	328
§ 9. Переход от квазистационарных состояний к стационарным	336
§ 10. Время соударения	339
§ 11. Типы долгоживущих состояний	343
Глава VIII. Основные свойства многоканальных систем	346
§ 1. Волновая функция многоканальной системы	346
§ 2. Сечения. Унитарность S -матрицы	353
§ 3. Обратимость времени. Симметрия S -матрицы	356
§ 4. Некоторые аналитические свойства S -матрицы	364
§ 5. Ограничения на величину вычетов элементов S -матрицы	367

§ 6. Выражение для S -матрицы. Ее связь с R -матрицей	371
§ 7. Среднее время жизни состояний непрерывного спектра	375
Глава IX. Пороговые явления	380
§ 1. Энергетическая зависимость сечения упругого рассеяния при малых энергиях	380
§ 2. Энергетическая зависимость сечений двухчастичных реакций при малых энергиях начальных или конечных частиц	385
§ 3. Энергетическая зависимость сечения рассеяния $X(a, a)X$ вблизи порога реакции $X(a, b)Y$; X, a, b, Y — бесспиновые нейтральные частицы	391
§ 4. Физика явлений вблизи порога неупругого канала	395
§ 5. Обобщение на случай частиц со спином	397
§ 6. Обобщение на случай многих каналов	402
§ 7. Форма особенностей вблизи порога рождения заряженных частиц	404
Глава X. Задача трех тел	413
§ 1. Обозначения	411
§ 2. Переход к уравнениям Липпмана—Швингера	420
§ 3. Уравнения Фаддеева	424
§ 4. Общие формулы для сечений	432
§ 5. Уравнение Скорнякова—Тер-Мартirosяна	434
§ 6. Движение двух частиц во внешнем потенциальном поле. Обозначения и постановка задачи	438
§ 7. Формулы для нахождения амплитуд различных процессов	446
§ 8. Две частицы во внешнем поле. Случай точечного взаимодействия между частицами	451
§ 9. Рассеяние нейтронов на химически связанном протоне	458
Глава XI. Модель Ли	463
§ 1. Введение. Импульсное представление	463
§ 2. Координатное представление	475
§ 3. Взаимодействие с нестабильной промежуточной частицей	480
§ 4. Взаимодействие частиц N и V	484
§ 5. Векторное взаимодействие	487
§ 6. Несохранение четности в модели Ли	498
§ 7. Электрический дипольный момент нестабильной частицы	505
<i>Приложения:</i> А. Спектр энергий уравнения Шредингера в особых случаях	513
Б. Квазиклассические свойства высоковозбужденных уровней в кулоновском поле	529
Литература	533
Алфавитный список авторов иностранных публикаций	542

ПРЕДИСЛОВИЕ КО ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ

Подобно тому как «демографический взрыв» тревожит социологов и экономистов, проблема «информационного взрыва» во весь рост стоит перед научными работниками и педагогами.

Разница между этими проблемами заключается в том, что ограничение рождаемости легче осуществить по отношению к народонаселению, чем по отношению к появлению новых статей.

Только редактор научного журнала мечтает о золотом веке, когда авторы сами строго рецензируют и отклоняют все свои статьи, за исключением гениальных.

Рождение статьи, содержащей хотя бы небольшое продвижение по сравнению с достигнутым уровнем знания доставляет авторам статьи удовлетворение, отказаться от которого невозможно. Не следует бороться с «информационным взрывом». Энергию этого взрыва, т. е. усилия огромной армии научных работников нужно направить в общее русло.

Возможно, что в химии и зоологии главным является классификация информации и механизация поиска материалов, относящихся к тому или иному химическому соединению или биологическому виду.

В теоретической физике, по нашему убеждению, важнейшее значение имеют обзоры и монографии, подытоживающие работы в определенных актуальных областях. Такой обзор должен по возможности объективно отбирать наиболее важные результаты большого числа работ.

В принципе учебники, обновляющие материал по мере развития науки, ставят перед собой ту же цель. На щите (точнее — в предисловии) знаменитого Курса теоретической физики Ландау и Лифшица начертано, что изучение курса дает подготовку, достаточную для работы над

оригинальными журнальными статьями. Фактически в последние годы ощущается некий разрыв между учебниками и новыми оригинальными работами. Предлагаемая книга предназначена для того, чтобы заполнить этот разрыв и служить промежуточным звеном между курсом квантовой механики и современным уровнем в ряде вопросов атомной и ядерной физики и отчасти физики элементарных частиц.

Перечислим общефизические вопросы, рассматриваемые в монографии.

1. Системы с малой энергией связи; примерами являются дейтон — отрицательный ион водорода.

2. Системы с кулоновым потенциалом — атом водорода.

3. Нестабильные системы — радиоактивные ядра, автоионизационные состояния.

4. Подробная теория гармонического осциллятора (отсутствовала в первом издании), применимая также к колебаниям электромагнитного поля в лазерных системах.

5. Системы с многоканальным сплошным спектром — сталкивающиеся частицы, которые в ходе столкновения перегруппировываются, т. е. вступают в ядерные реакции.

6. Системы, состоящие из трех тел (в первом издании не рассматривались).

Наряду с объектами, относящимися к атомной и ядерной физике, рассматриваемыми в монографии, нужно отметить те общие методы теоретической физики, которые рассмотрены гораздо более подробно, чем это делается в учебниках, например:

1. Аналитические свойства волновой функции и матрицы рассеяния.

2. Функция Грина уравнения Шредингера.

3. Квазиклассическое приближение.

Несколько особняком стоит глава о теории перенормировки. Традиционно теория перенормировки рассматривается на поздней стадии изучения теории квантованных полей. При строго логическом подходе такое расположение материала вполне обосновано: теория перенормировки в применении к элементарным частицам требует

релятивистских уравнений. Однако опыт изучения и преподавания говорит о больших педагогических трудностях строгого подхода.

На учащегося сразу обрушиваются трудности различной природы — как те, которые связаны с самими понятиями перенормировки, так и трудности релятивистской теории с бесконечным числом процессов и диаграмм.

Представляется целесообразным на модели, не имеющей реального физического прототипа, уяснить одну сторону дела — принцип введения перенормированной массы и заряда. Эта задача решается на примере модели Ли, причем способом несколько отличным от предложенного самим Ли.

Второе издание сдано в печать через 3,5 года после сдачи первого. Объем переработки характеризуется тем, что общее число листов и список литературы увеличились примерно в полтора раза.

В книге принята новая по сравнению с предыдущим изданием система ссылок на научную литературу; в тексте приводится не номер ссылки, а фамилия автора и год издания. При этом фамилии иностранных авторов даны в русской транскрипции. В затруднительных случаях транскрипцию иностранных авторов можно установить по списку, приведенному в конце книги на стр. 542.

В предисловии не принято указывать, какие вопросы не освещены в книге, — перечисление их трудно ограничить, и оно наносит ущерб авторам.

Отступая от традиции, мы хотим отметить два вопроса, которые естественно было бы ожидать в современном изложении квантовой механики: это полюса Редже и фейнмановские интегралы по траекториям. Оба вопроса хорошо освещены в литературе на русском языке, и поэтому мы сочли возможным опустить их.

Пользуемся случаем поблагодарить В. С. Попова, просмотревшего новый вариант книги, за ряд полезных замечаний.

А. Базь, Я. Зельдович, А. Переломов

ГЛАВА I

ДИСКРЕТНЫЙ СПЕКТР

§ 1. Введение

Настоящая глава посвящена описанию некоторых свойств решений уравнения Шредингера, принадлежащих дискретному спектру. Как известно, такие решения описывают связанные состояния. Мы разберем три конкретных случая: а) состояния с малой энергией связи, б) связанные состояния в кулоновском поле, в) состояния трехмерного гармонического осциллятора.

Состояния с энергией связи ϵ , малой по сравнению с глубиной ямы U_0 , имеют важное значение в приложениях; в качестве примера можно привести основное состояние дейтона. Свойства этих состояний довольно подробно рассмотрены в §§ 2 и 3, причем особое внимание уделено тому случаю, когда $\epsilon \rightarrow 0$, т. е. уровень только что появился. В следующем параграфе рассматривается движение частицы в поле нескольких потенциальных ям. При этом вводится и обосновывается важное понятие псевдопотенциала.

Поскольку случаи б) и в) подробно разбираются практически во всех учебниках по квантовой механике, мы обратим все внимание на выяснение специфических, качественных свойств этих состояний. В этих случаях, как известно, существует вырождение (обычно называемое «случайным» вырождением) между состояниями с различными значениями момента количества движения l . Поэтому стационарными состояниями являются также суперпозиции состояний с различными значениями l , и наряду с обычной классификацией уровней можно ввести и другую классификацию.

Выражение «случайное» вырождение не надо понимать буквально!

Возникновение такой ситуации всегда не случайно. Оно является следствием особого свойства классической механической системы — наличия замкнутых траекторий. В квантовой механике уравнение Шредингера для таких систем допускает разделение переменных в нескольких системах координат. Более важным свойством, однако, является существование группы преобразований, которые оставляют уравнение Шредингера неизменным. Все остальные свойства являются следствием существования этой группы. Эти вопросы рассмотрены в § 5 для кулоновского потенциала и в следующем параграфе для осциллятора. В § 6 рассмотрены также так называемые «когерентные» состояния. Эти состояния, не являющиеся стационарными, обладают рядом интересных свойств; например свойством наибольшей близости (в некотором смысле этого слова) к свойствам классического осциллятора.

В § 7 дан вывод так называемой теоремы вириала и рассмотрены некоторые ее обобщения. Наконец, в последнем параграфе этой главы рассматривается вопрос о статистических свойствах системы тождественных частиц.

Несколько слов о чтении книги.

Параграф первый дается лишь для того, чтобы ввести обозначения, употребляемые далее. Читателю, недавно изучавшему обычный курс квантовой механики, настоятельно рекомендуем не читать дальше этот параграф. В противном случае он получит превратное представление о содержании и может отложить книгу, не дойдя до вещей, ему неизвестных и интересных.

Напомним теперь некоторые основные положения квантовой механики.

Состояние системы в нерелятивистской квантовой механике полностью описывается волновой функцией Ψ , а изменение Ψ -функции с течением времени определяется уравнением Шредингера (в дальнейшем для сокращения будем писать у. Ш.)

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

где H — гамильтониан системы, \hbar — постоянная Планка.

Мы будем рассматривать в основном (за исключением § 4 гл. V и гл. VI) тот случай, когда гамильтониан не зависит явно от времени. При этом существуют стационарные состояния, т. е. состояния, для которых плотность вероятности $|\Psi|^2$ с течением времени не изменяется. Волновая функция такого состояния имеет вид

$$\Psi(t) = \psi e^{-\frac{iEt}{\hbar}};$$

отсюда следует, что ψ является собственной функцией гамильтониана

$$H\psi = E\psi, \quad (1.2)$$

описывающей состояние с определенной вещественной энергией E .

Для случая одной частицы в постоянном внешнем поле имеем

$$\left. \begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}), \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r})\right) \psi(\mathbf{r}) &= E\psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \right\} \quad (1.2')$$

Волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ должна удовлетворять обычным условиям: она обязана быть однозначной*) и непрерывной во всем пространстве.

В большом числе практически важных задач потенциал $U(\mathbf{r})$ является сферически симметричным, т. е. зависит только от r . В таком поле оператор момента количества движения L коммутирует с оператором Гамильтона H (это соответствует сохранению момента количества движения в классической механике). Кроме того, оператор H коммутирует с оператором инверсии P

*) Условие однозначности волновой функции подробно рассматривалось В. Паули (1939). Это условие приводит, например, к таким нетривиальным эффектам, как квантование магнитного потока в многосвязном сверхпроводнике (Ф. Лондон, 1950; Н. Байерс, Чж. Н. Янг, 1961) и возникновение квантованных вихревых нитей в жидком гелии (Л. Онзагер, 1949; Р. Фейнман, 1955). Оно играет существенную роль при выводе квантовых условий Бора — Зоммерфельда для многомерного случая, см. § 3 гл. V.

(свойство, не имеющее аналога в классической механике (Е. Вигнер, 1964)).

Так как операторы H , L^2 , L_z и P коммутируют друг с другом, то собственные состояния H могут являться одновременно и собственными состояниями L^2 , L_z и P . Иными словами, стационарное состояние может иметь определенное значение орбитального момента l , причем $L^2 = l(l+1)$, где l — целое; определенное значение проекции момента m на произвольно выбранную ось z , причем m принимает $(2l+1)$ значение от $-l$ до $+l$, и определенную четность $P = +1$ или $P = -1$. В одночастичной задаче четность однозначно определяется орбитальным моментом $P = (-1)^l$, т. е. совпадает с четностью числа l . Из сказанного выше следует, что существуют решения у. Ш., имеющие вид

$$\psi(r) = R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (1.3)$$

Здесь θ и φ — полярный и азимутальный углы вектора r , $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции, а $R_l(r)$ — функция, зависящая только от r . После подстановки (1.3) в (1.2') для R_l получается уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l = 0. \quad (1.4)$$

Введем новую функцию

$$\chi_l(r) = r R_l(r), \quad (1.3')$$

которая удовлетворяет уравнению

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \left(V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] \chi_l = 0, \quad (1.5)$$

уже не содержащему первой производной. Величина k здесь равна $\sqrt{2mE/\hbar^2}$, а $V = \frac{2m}{\hbar^2} U$.

Там, где это не сможет вызвать недоразумений, мы и V будем называть потенциалом.

Центробежный потенциал $\frac{l(l+1)}{r^2}$ можно включить в V , после чего уравнение (1.5) принимает вид

$$\chi_k'' + (k^2 - V(r)) \chi_k = 0. \quad (1.6)$$

Свойства этого уравнения хорошо известны из курсов квантовой механики (и в первую очередь из «Квантовой механики» Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963). Отметим еще весьма полный курс Р. Ньютона (1966)*).

В случае несингулярного потенциала $\psi(r)$ конечна, откуда следуют граничные условия для χ_k :

$$\left. \begin{aligned} \chi_k(r) &\rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow 0, \\ \frac{\chi_k(r)}{r} &\text{ конечна при } r \neq 0 \text{ и } r \rightarrow \infty. \end{aligned} \right\} \quad (1.7)$$

Кроме того, χ_k и χ_k' , естественно, при $r > 0$ должны быть непрерывными**).

Условимся также в тех случаях, когда при $r \rightarrow \infty$ $V(r)$ стремится к определенному пределу, таким образом выбирать начало отсчета шкалы энергии, чтобы на бесконечности потенциал $V(r)$ обращался в нуль.

Почти все встречающиеся в природе взаимодействия между частицами (кроме кулоновского и некоторых других) описываются быстро падающими потенциалами, т. е. потенциалами, убывающими быстрее, чем $1/r$, при больших r . Во многих случаях к тому же при r , большем некоторого R , этими взаимодействиями можно пренебречь и считать, что $V(r) = 0$ при $r > R$. Такие потенциалы будем называть короткодействующими. Введение радиуса обрезания R сильно упрощает все формулы, и мы сначала рассмотрим именно этот случай. Центробежный потенциал нельзя считать короткодействующим, и, чтобы не усложнять дела, положим орбитальный момент l равным нулю.

*) История возникновения и развития квантовомеханических представлений подробно рассмотрена в книге М. Яммера (1966) и сборнике оригинальных работ по квантовой механике под редакцией Б. ван дер Вардена (1967). Математически строгое исследование ряда принципиальных вопросов квантовой механики, например процесса измерения, можно найти в книге И. фон Неймана (1932). Современное изложение этих вопросов дано в книге Дж. Яуха (1968). Приближенные методы в квантовой механике рассмотрены в книге А. Б. Мигдала и В. П. Крайнова (1966).

***) Это связано с тем обстоятельством, что в уравнение (1.6) входят вторые производные: в случае разрывного χ_k или χ_k' правая часть (1.6) не равна нулю, а содержит δ - или δ' -функцию.

Итак, мы приходим к следующей постановке задачи: найти все решения $\chi_k(r)$ уравнения

$$\left. \begin{aligned} \chi_k'' + (k^2 - V(r)) \chi_k &= 0 \quad \text{при } r < R, \\ \chi_k'' + k^2 \chi_k &= 0 \quad \text{при } r \geq R, \end{aligned} \right\} \quad (1.6')$$

удовлетворяющие условиям (1.7). При этом волновая функция

$$\psi(r) = R_{k0}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_k(r)}{r}. \quad (1.3'')$$

В области $r > R$, как видно из второго уравнения (1.6'), имеются два решения *)

$$\chi_k^{(\pm)} = e^{\pm ikr}. \quad (1.8)$$

При $r < R$ также имеются два решения, но из них можно использовать лишь одно, так как второе не удовлетворяет граничному условию при $r = 0$. Действительно, будем искать χ_k при $r \rightarrow 0$ в виде степенной функции r^σ ; тогда из (1.6')

$$\sigma(\sigma - 1) \approx -r^2(k^2 - V(r)).$$

Если $r^2 V(r) \rightarrow 0$ **, то для σ получаются два значения: 0 и 1. Соответственно этому при $r \rightarrow 0$ у. Ш. допускает два решения:

$$\psi_1(r) \rightarrow a \quad \text{при } r \rightarrow 0, \quad \psi_2(r) \rightarrow \frac{b}{r} \quad \text{при } r \rightarrow 0,$$

где a и b — постоянные. Решение ψ_2 , однако, должно быть отброшено, так как

$$\Delta \frac{b}{r} = -4\pi b \delta(r)$$

*) В случае быстро падающих потенциалов также существуют два решения $\chi_k^{(\pm)}(r)$, которые при больших значениях r ведут себя как $e^{\pm ikr}$. Эти решения часто обозначают через $f(\mp k, r)$. Их свойства были довольно подробно рассмотрены в работе Р. Йоста (1947). Для потенциалов с кулоновским хвостом $U \approx a/r$ при $r \rightarrow \infty$

асимптотика функций $\chi_k^{(\pm)}(r)$ имеет вид $e^{\pm i(kr - \eta \ln 2kr)}$, где $\eta = \frac{ma}{\hbar^2 k}$.

**) Если это условие не выполняется, то потенциал называется сингулярным. Новые качественные явления, возникающие при этом, обсуждаются в приложении А.

и, следовательно, ψ_2 в точке $r = 0$ не удовлетворяет у. Ш. *). Остается единственное решение ψ_1 , отвечающее значению $\sigma = 1$.

Приведенное рассуждение можно рассматривать как обоснование наложенного выше граничного условия $\chi(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Решение, удовлетворяющее этому условию, будем обозначать через $\chi_k^{(0)}(r)$.

Рассмотрим теперь области положительных и отрицательных энергий **). Положительным энергиям соответствуют действительные значения k . В этом случае оба решения (1.8) остаются конечными при всех значениях $r \geq R$, т. е. оба решения в этой области приемлемы.

Наиболее общее решение при $r > R$ можно записать как

$$\chi_k(r) = A(k) (\chi_k^{(-)} - S(k) \chi_k^{(+)}). \quad (1.9)$$

При $r = R$ это решение должно непрерывным образом сшиваться с решением во внутренней области:

$$\left. \begin{aligned} A(k) (\chi_k^{(-)} - S(k) \chi_k^{(+)})|_{r=R} &= \chi_k^{(0)}(R), \\ A(k) (\chi_k^{(-')} - S(k) \chi_k^{(+')})|_{r=R} &= \chi_k^{(0)'}(R). \end{aligned} \right\} \quad (1.10)$$

Сшивку всегда можно произвести, подобрав соответствующим образом величины A и S . Действительно, рассматривая (1.10) как систему уравнений для определения A и S , легко получить

$$\left. \begin{aligned} S(k) &= \frac{\chi_k^{(-)'} \chi_k^{(0)} - \chi_k^{(-)} \chi_k^{(0)'}}{\chi_k^{(+)' \chi_k^{(0)} - \chi_k^{(+)} \chi_k^{(0)'}} \Big|_{r=R}, \\ A(k) &= \frac{\chi_k^{(+)' \chi_k^{(0)} - \chi_k^{(+)} \chi_k^{(0)'}}{2ik} \Big|_{r=R}. \end{aligned} \right\} \quad (1.11)$$

Таким образом, при каждом положительном значении энергии имеется одно и только одно решение у. Ш. Физический смысл этого решения мы обсудим позже.

*) Такого типа решение мы используем для описания точечного взаимодействия.

**) Более подробно случай положительных энергий разбирается в гл. II.

При отрицательных энергиях положение существенно меняется. Отрицательным E соответствуют мнимые k : $k = i|k|^*$.

Решение $\chi_k^{(-)} = e^{i|k|r}$ экспоненциально возрастает при $r \rightarrow \infty$ и, следовательно, не удовлетворяет второму из условий (1.7). Наиболее общее решение при $r > R$, стало быть, имеет вид

$$A(k)\chi_k^{(+)}(r), \quad (1.12)$$

а условие сшивания внешней и внутренней функций —

$$\frac{\chi_k^{(+)'}}{\chi_k^{(+)}} \Big|_{r=R} = \frac{\chi_k^{(0)'}}{\chi_k^{(0)}} \Big|_{r=R} = -|k|. \quad (1.13)$$

По существу, это условие является трансцендентным уравнением для определения $|k|$ и, следовательно, оно может выполняться лишь при некоторых дискретных мнимых значениях $k = k_n$ (или соответственно при дискретных отрицательных значениях энергии E_n).

Необходимо также, как видно из (1.13), чтобы логарифмическая производная функции $\chi_k^{(0)}$ была отрицательна. Это, как будет видно из дальнейшего, имеет место, лишь если $V(r)$ является в основном отрицательным (что соответствует притяжению) и достаточно большим по абсолютной величине. В этом случае функции дискретного спектра при $r > R$ имеют вид

$$\chi_{k_n}(r) = A(k_n)\chi_{k_n}^{(+)}(r) = A(k_n)e^{-|k_n|r},$$

т. е. экспоненциально затухают при больших r **. При

*) Мы считаем, как это обычно принято, что k находится в верхней полуплоскости. Можно было бы рассмотреть и значения k в нижней полуплоскости; при этом $\chi^{(+)}$ и $\chi^{(-)}$ поменялись бы ролями.

**) Заметим, что в случае быстро падающих потенциалов функция $\chi_{k_n}(r)$ асимптотически ведет себя как $e^{-|k_n|r}$ при $r \rightarrow \infty$,

а для потенциалов с кулоновским хвостом $U(r) \sim \frac{\alpha}{r}$ при $r \rightarrow \infty$

$$\chi_{k_n}(r) \sim r^{-\eta_n} e^{-|k_n|r}, \quad \eta_n = \frac{m\alpha}{\hbar^2 |k_n|}.$$

$r < R$ функции конечны, и потому интеграл

$$\int_0^\infty |\chi_{k_n}(r)|^2 dr \quad (1.14)$$

сходится. Функцию χ_{k_n} обычно нормируют так, чтобы этот интеграл был равен единице. Так как χ_{k_n} экспоненциально затухает при $r > R$, то решению соответствует локализованное в пространстве состояние частицы. Подобные решения отвечают классическому финитному движению частицы с отрицательной энергией, а соответствующие им состояния в обычном случае несингулярного потенциала называют связанными состояниями*).

Таким образом, при положительных энергиях у. Ш. имеет решение (удовлетворяющее граничным условиям) при каждом положительном значении E (т. е. при $k^2 > 0$), притом при любом значении l .

Для отрицательных энергий при фиксированном значении l решения возможны (если вообще возможны) лишь при некоторых дискретных значениях $E = E_{nl}$. Формулируют это обычно так: при положительных энергиях спектр собственных значений энергии непрерывен, а при отрицательных — дискретен.

В случае дискретного спектра каждый уровень, вообще говоря, имеет определенное значение l . Уровни с одинаковым l , но различными m , вырождены, что является следствием сферической симметрии потенциала.

Однако при $l \neq 0$ сами решения уже не являются сферически-симметричными; их угловая зависимость определяется угловой частью волновой функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ **).

*) В случае сингулярного потенциала ситуация усложняется, см. Приложение А.

**) Отметим тут же, что сумма $\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ не зависит от

углов θ и φ . Отсюда следует, что если при данном l частица с одинаковой вероятностью может находиться в состояниях со всеми возможными значениями m , то плотность вероятности найти частицу в заданной точке пространства обладает сферической симметрией.

С этим же обстоятельством связан и тот факт, что в случае замкнутых электронных оболочек атома или же замкнутых оболочек ядра плотность заряда сферически-симметрична.

При этом решение обладает также определенной четностью P . Вырождение, соответствующее различным m при одинаковом l , ничего не меняет — все вырожденные уровни и любая их линейная комбинация (также являющаяся решением) обладают одним и тем же P . Величина $|\psi|^2$ — плотность вероятности (для заряженной частицы — плотность заряда) при инверсии координат не изменяется, так как при такой замене ψ переходит либо в ψ , либо в $-\psi$.

Так доказывается, что распределение заряда в сферически-симметричном потенциале всегда имеет центр симметрии (хотя и не обязано быть сферически-симметричным) и, следовательно, электрический дипольный момент должен быть равен нулю.

В специальном, физически весьма важном случае кулоновского потенциала $U = -\frac{Ze^2}{r}$ имеет место так называемое случайное вырождение, т. е. точное равенство энергии уровней с различными l . При этом нарушается и вывод об обязательном равенстве нулю дипольного момента, т. е. частица может находиться в состоянии с дипольным моментом, отличным от нуля (этот эффект будет специально рассмотрен ниже, в § 5).

§ 2. Состояния с малой энергией связи

Рассмотрим у.Ш. с $U(r) < 0$. Заметим, что в этом случае имеется следующее различие между классической и квантовой механикой: в классической механике достаточно любой, самой маленькой потенциальной ямы, чтобы связать частицу; частица может покоиться на дне этой ямы, т. е. существует решение с $E = U_{\min} < 0$.

В квантовой механике в трехмерной задаче, оказывается, есть определенные критические условия для того, чтобы существовал хотя бы один дискретный уровень; для этого яма должна быть достаточно «широка и глубока». Такой результат качественно понятен с точки зрения принципа неопределенности: частица может быть связана потенциалом $U(r)$, если она проводит определенную долю времени в области, где потенциал отличен от нуля и отрицателен. Но локализация частицы означает

увеличение ее среднего импульса и средней кинетической энергии. Поэтому в неглубокой и узкой яме невозможно построить решение с отрицательной полной энергией, нет дискретного уровня*).

Большой интерес представляет ситуация на грани возникновения дискретного уровня, когда уровень только-только появился, т. е. когда глубина и ширина ямы близки к своему критическому значению. При этом получается решение, отличающееся тем, что частица лишь малую долю времени проводит в яме (эта доля стремится к нулю при приближении к критическим условиям) и свойства решения слабо зависят от вида $U(r)$. С такой ситуацией мы сталкиваемся, например, в теории дейтона — связанного состояния протона и нейтрона (Г. Бете, Р. Пайерлс, 1935).

Найдем сперва условие существования уровня в случае «прямоугольной ямы», т. е. потенциала вида**)

$$\left. \begin{aligned} U &= -U_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} V_0 & \text{при } r \leq R, \\ U &= 0 & \text{при } r > R. \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

Уравнение Шредингера (1.6) имеет вид

$$\left. \begin{aligned} \chi'' + (-\kappa^2 + V_0)\chi &= 0 & \text{при } r \leq R, \\ \chi'' - \kappa^2\chi &= 0 & \text{при } r > R. \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

Здесь мы ввели обозначение $\kappa = -ik$. Так как нас интересуют связанные состояния, энергия которых отрицательна, то k является чисто мнимым ($k = i|k|$), так что κ оказывается действительным: $\kappa = |k|$.

*) Впрочем, это рассуждение не вполне совершенно, поскольку оно кажется применимым также к одномерному и двумерному случаям, а в этих случаях уровень существует при любом значении глубины и ширины ямы (см. по этому поводу примечание на стр. 22). Отметим здесь же, что при любой глубине ямы включение сколь угодно слабого магнитного поля приводит к появлению уровня (Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев, 1965А).

**) Мы предполагаем выполненными условия $R > \hbar/mc$ и $U_0 < mc^2$, необходимые для возможности описания взаимодействия частиц с помощью потенциальной ямы.

Удовлетворяющие граничным условиям решения (2.2) имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \chi &= B \sin Kr, & K &= \sqrt{V_0 - \kappa^2} & \text{при } r \leq R, \\ \chi &= Ae^{-\kappa r} & & & \text{при } r > R. \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

Приравнявая значения этих функций и их производных в точке сшивки $r = R$, получаем

$$\left. \begin{aligned} B \sin KR &= Ae^{-\kappa R}, \\ BK \cos KR &= -\kappa Ae^{-\kappa R}. \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

Найдем абсолютную величину потенциала $|U| = U_1$, необходимого для возникновения связанного состояния. Энергия состояния, которое только что появилось, равна, очевидно, нулю. Поэтому, полагая $\kappa = 0$ в (2.4), получаем

$$\sqrt{V_1}R = \frac{\pi}{2}, \quad V_1 = \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{R^2}; \quad U_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mR^2}. \quad (2.5)$$

Зависимость $U_1 \sim R^{-2}$ относится не только к прямоугольной яме, а является общей. В самом деле, пусть для определенного $U(r)$ у. Ш. имеет решение $\psi(r)$ с данной энергией E . Произведем преобразование подобия $\psi(r) \rightarrow \psi_1(r) = \alpha^{3/2} \psi(\alpha r)$. (Множитель $\alpha^{3/2}$ перед ψ выбран так, чтобы сохранялась нормировка. В силу линейности этот множитель в у. Ш. сократится.)

Для того чтобы у. Ш. с новым ψ удовлетворялось тождественно, нужно произвести замену $E \rightarrow E_1 = \alpha^2 E$ и $U(r) \rightarrow \alpha^2 U(\alpha r)$, так как

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi(\alpha r) + \alpha^2 (-U(\alpha r) + E) \psi(\alpha r) &= \\ &= \alpha^2 \left[\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\alpha r} - U(\alpha r) + E \right] \psi(\alpha r) \equiv 0. \end{aligned}$$

Таким образом, при преобразовании подобия уменьшение линейных размеров в α раз сопровождается увеличением всех энергий $\sim \alpha^2$, т. е. обратно пропорционально квадрату линейных размеров. Физическая причина, этого в том, что импульс обратно пропорционален длине волны, а следовательно, кинетическая энергия обратно пропорциональна квадрату длины.

Найдем вероятности W_1 и W_2 того, что частица находится «в яме» (т. е. в области $r < R$) или вне ямы ($r > R$) соответственно; эти вероятности равны $W_1 = \int_0^R \chi^2 dr$ и $W_2 = \int_R^\infty \chi^2 dr$, а сумма их $W_1 + W_2 = 1$ по условию нормировки. Приведем точное значение величины W_2 :

$$W_2 = (1 + \kappa R)^{-1} \left(1 - \frac{\kappa^2}{V_0} \right).$$

Пренебрегая κ^2 по сравнению с V_0 под корнем в (2.3) и считая $\sqrt{V_0}R \approx \pi/2$, найдем

$$\frac{W_1}{W_2} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{\kappa^2}{V_0}}.$$

Таким образом, при $\frac{\kappa^2}{V_0} \rightarrow 0$ частица почти все время проводит вне ямы *).

Среднее значение кинетической энергии

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \psi|^2 dr \approx \frac{\pi}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{V_0 \kappa^2} \approx W_1 U_0.$$

Среднее значение потенциальной энергии

$$\bar{U} = \int U |\psi|^2 dr = -W_1 U_0 \approx -\frac{\pi}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{V_0 \kappa^2}.$$

Так как $\bar{T} \gg |E|$, $|\bar{U}| \gg |E|$, то энергия связи $\epsilon = -E = |\bar{U}| - \bar{T}$ является малой разностью двух больших величин. Чтобы найти E как сумму $\bar{T} + \bar{U}$, надо вычислить

*) Нетрудно видеть, что это утверждение остается справедливым для связанного состояния с $l=0$ и $\epsilon \rightarrow 0$ в произвольном короткодействующем потенциале. В соответствии с этим при $\epsilon = 0$ волновая функция уже не является нормируемой. Однако при наличии дальнедействующего потенциала отталкивания ситуация меняется: величина W_1 стремится при $\epsilon \rightarrow 0$ к определенному пределу, отличному от нуля, а волновая функция остается нормированной и при $\epsilon = 0$: при наличии кулоновского взаимодействия $\chi_{r \rightarrow \infty} \sim e^{-\sqrt{8m\alpha r/\hbar^2}}$; при отсутствии его, но при $l \neq 0$, $\chi_{r \rightarrow \infty} \sim r^{-l}$.

следующие члены разложения \bar{T} и \bar{U} по степеням κ^2/V_0 , что мы предоставляем проделать самому читателю *).

При данном R есть критическое значение U_1 , при котором $E = 0$. Будем теперь постепенно «углублять» потенциал и посмотрим, как изменится энергия связи.

Применяя теорию возмущений, найдем

$$dE = W_1 dU \approx \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{|E|}{U_1}} dU.$$

Отсюда сразу же следует

$$-2d\sqrt{-E} = \frac{\pi}{2} \frac{dU}{\sqrt{U_1}}, \quad \varepsilon = -E = \frac{\pi^2}{16} \frac{(|U| - U_1)^2}{U_1}. \quad (2.6)$$

Таким образом, кривая зависимости энергии связи от глубины ямы имеет при возникновении уровня характерную особенность — она касается оси абсцисс (рис. 1). Этот факт является общим и не зависит от конкретного вида потенциала $U(r)$, т. е. в случае s -состояния ($l = 0$) справедлив для любого потенциала.

До сих пор рассматривался простейший вид потенциала — прямоугольная яма. Оказывается, однако, что необходимое условие существования связанного состояния можно получить и в случае произвольного потенциала. Заметим прежде всего, что если потенциал $V^{(1)}(r) < V(r)$ при всех r , то для соответствующих чисел связанных состояний $n_1^{(1)}$ и n_1 с орбитальным моментом l имеет место неравенство $n_1^{(1)} \geq n_1$. Поскольку в случае необходимости можно перейти к рассмотрению потен-

*) Легко убедиться в том, что в одномерном случае при $\frac{\kappa^2}{V_0} \rightarrow 0$
 $\frac{W_1}{W_2} \approx \frac{\kappa^2}{V_0} = 4V_0 R^2$, $\bar{U} \approx -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$, $\bar{T} \approx \frac{1}{12} \frac{\kappa^2}{V_0} |\bar{U}|$, т. е. $\bar{T} \ll |\bar{U}|$,

и потому всегда существует уровень с энергией $E \approx \bar{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} 4V_0^2 R^2$.

В двумерном случае уровень также всегда существует, однако энергию связи таким способом получить не удастся, поскольку в этом случае $\bar{T} \approx |\bar{U}|$, а $E = \bar{T} - |\bar{U}|$ оказывается экспоненциально малой величиной.

циала $V^{(1)}(r) = -|V(r)| \leq V(r)$, можно ограничиться рассмотрением всюду притягивающих потенциалов ($V(r) \leq 0$).

Начнем с рассмотрения состояний с $l = 0$, $E = 0$. Уравнение (1.6) в этом случае принимает вид

$$\chi_0'' + |V| \chi_0 = 0. \quad (2.7)$$

Интегрируя (2.7) по r от 0 до ∞ , что можно сделать в случае не слишком сингулярного потенциала, и учитывая, что в момент появления первого уровня $\chi_0'(\infty) = 0$, получаем

$$\int_0^{\infty} |V| \chi_0 dr = \chi_0'(0). \quad (2.8)$$

Нормируем теперь волновую функцию χ_0 так, что $\chi_0'(0) = 1$. Поскольку волновая функция основного состояния не имеет нулей, то $\chi_0(r) > 0$. С другой стороны, в силу отрицательности потенциала $\chi_0'' = V \chi_0 \leq 0$, откуда следует, что $\chi_0'(r)$ монотонно уменьшается с ростом r , и следовательно, $\chi_0(r) < r$. Подставляя в (2.8) r вместо $\chi_0(r)$, приходим к условию существования связанного состояния

$$I = \int_0^{\infty} |V| r dr \geq 1. \quad (2.9)$$

Это условие, полученное впервые в работе Р. Йоста и А. Пайса (1951), необходимо, но, как будет видно из простейших примеров, еще недостаточно для существования связанного состояния.

Если притягивающий потенциал ($V(r) < 0$) является монотонной функцией ($V'(r) > 0$), то известно еще одно необходимое условие существования связанного состояния, полученное Ф. Калоджеро (1967):

$$\frac{2}{\pi} \int \sqrt{-V(r)} dr \geq 1. \quad (2.10)$$

Это неравенство не может быть усилено, поскольку знак равенства достигается для потенциала типа прямоугольной ямы.

Обобщение условия (2.9) на случай произвольного орбитального момента l и не обязательно основного состояния имеет вид (В. Баргманн, 1952)

$$n_l(2l+1) < \int |V| r dr. \quad (2.11)$$

Заметим, что для потенциала $V(r) = -g^2\delta(r-r_0)$ (здесь $\delta(r-r_0)$ — одномерная δ -функция) неравенство (2.11) в случае возникновения первого связанного состояния превращается в равенство, и потому усилить его, не накладывая дополнительных ограничений на потенциал, нельзя. Приведем простой вывод этого неравенства, данный Ю. Швингером (1960А). Заменим $V(r)$ на $\lambda V(r)$ и будем увеличивать λ от 0 до 1. При таком увеличении потенциала в нем будут последовательно возникать связанные состояния. Пусть i -е связанное состояние возникает при $\lambda = \lambda_i$, тогда $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n < 1 < \lambda_{n+1}$. Уравнение (1.5) для нулевой энергии $E = 0$ эквивалентно интегральному уравнению (см. гл. IV)

$$\chi_l = \lambda \int_0^\infty dr' g_l(r, r') |V(r')| \chi_l(r'), \quad (2.12)$$

где

$$g_l(r, r') = \frac{1}{2l+1} r_{<}^{l+1} r_{>}^{-l}, \quad r_{<} = \min(r, r'), \quad r_{>} = \max(r, r'). \quad (2.13)$$

После замены

$$\Phi_l = |V|^{1/2} \chi_l, \quad K_l(r, r') = |V(r)|^{1/2} g_l(r, r') |V(r')|^{1/2} \quad (2.14)$$

приходим к уравнению с симметричным ядром

$$\int_0^\infty dr' K_l(r, r') \Phi_l(r') = \lambda^{-1} \Phi_l(r). \quad (2.15)$$

Но след оператора равен сумме его собственных значений, откуда находим

$$\begin{aligned} \int dr K_l(r, r) &= \\ &= \frac{1}{2l+1} \int_0^\infty |V(r)| r dr = \sum_{i=1}^\infty \frac{1}{\lambda_i} > \sum_{i=1}^{n_l} \frac{1}{\lambda_i} > \sum_{i=1}^{n_l} 1 = n_l, \end{aligned} \quad (2.16)$$

т. е. мы получили неравенство (2.11).

Рассмотрим теперь условие появления первого уровня для потенциалов нескольких простейших типов. Обозначим через I интеграл $\int_0^\infty |V| r dr$, входящий в условие Иоста — Пайса (2.9), а через I_0 — то значение интеграла, при котором появляется первый уровень. Как нетрудно видеть, при рассмотренном выше преобразовании подобия $V(r) \rightarrow \alpha^2 V(\alpha r)$ величины I , I_0 не меняются. Значения I_0 приведены в таблице *)

№	Потенциал $V(r)$	I_0
1	$-g^2\delta(r-r_0)$	1
2	$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R, \\ 0, & r > R \end{cases}$	$\frac{\pi^2}{8} = 1,234$
3	$-V_0 e^{-\mu r}$	$\frac{\zeta_0^2}{4} = 1,445$
4	$-V_0 \frac{1}{e^{\mu r} - 1}$	$\frac{\pi^2}{6} = 1,645$
5	$-g^2 \frac{e^{-\mu r}}{r}$	1,68
6	$V(r) = \begin{cases} -V_0 \left(\frac{R}{r}\right)^s, & r < R, \\ 0, & r > R \end{cases}$	$\frac{\zeta_{v-1}^2}{4v}$, $v = \frac{1}{2-s}$

Здесь через ζ_v обозначен наименьший положительный корень уравнения $J_v(\zeta) = 0$, $J_v(\zeta)$ — функция Бесселя порядка v .

*) Эта таблица взята из неопубликованной работы В. С. Попова.

Обратим внимание на последнюю строчку таблицы. Если $s \rightarrow 2$, то $\nu \rightarrow \infty$, $\zeta_\nu \sim \nu \rightarrow \infty$ и $I_0 \sim \frac{1}{4(2-s)} \rightarrow \infty$. Это означает, что для потенциалов с сингулярностью в начале координат, близкой к $1/r^2$, использовать (2.9) для оценки появления первого уровня не имеет смысла. В то же время для потенциалов, обычно используемых в ядерной физике (потенциалы 2—5 из таблицы), истинное значение I_0 близко к единице.

§ 3. Точечное взаимодействие и эквивалентность его граничному условию

Рассмотрим теперь явления, происходящие с частицей, находящейся на связанном уровне с $E = -|E_0|$ или при рассеянии частиц с энергией порядка $|E_0|$. Будем считать, что глубина ямы велика по сравнению с $|E_0|$. В предельном случае $|E_0|/|U| \rightarrow 0$ возникает существенное упрощение теории. В этом случае при фиксированном E_0 надо устремить $|U|$ к ∞ ; при этом $R \rightarrow 0$ так, что $|U|R^2 \rightarrow \text{const}$.

Таким образом, особенности ситуации при возникновении уровня дают также ответ на вопрос о свойствах решения в случае сингулярного потенциала с $|U| \rightarrow \infty$, $R \rightarrow 0$ при фиксированной энергии связи. Такой потенциал описывает точечное взаимодействие, так как он отличен от нуля лишь при $r = 0$. Будем условно называть его трехмерным δ -потенциалом *).

Решения у. Ш., а также их производные должны быть непрерывны при $r = R$:

$$\psi_1 = \psi_2, \quad \frac{d\psi_1}{dr} = \frac{d\psi_2}{dr}.$$

Эти два условия можно переписать в виде

$$\psi_1 = \psi_2, \quad \frac{1}{\psi_1} \frac{d\psi_1}{dr} = \frac{1}{\psi_2} \frac{d\psi_2}{dr} \quad \text{при } r = R.$$

Но выполнение первого условия тривиально, так как уравнение линейно и ψ_1 , не удовлетворяющее первому

*) Это выражение нельзя понимать буквально, поскольку

$$\int U(r) dr \sim U_0 R^3 \sim \text{const } R \rightarrow 0.$$

условию, всегда можно умножить на константу C так, чтобы $C\psi_1|_{r=R} = \psi_2|_{r=R}$. При этом $\frac{1}{\psi_1} \frac{d\psi_1}{dr}$ не изменится: следовательно, именно второе условие является нетривиальным.

Из условия сшивания решения внутри ямы с решением вне ямы $\psi_2 \sim r^{-1}e^{-\kappa r}$ следует, что на границе ямы при $r = R$ (а в пределе $R \rightarrow 0$ при $r = 0$)

$$\frac{d \ln \chi}{dr} = -\kappa. \quad (3.1)$$

Существенно то, что в пределе при $R \rightarrow 0$ небольшое по сравнению с U_0 изменение энергии, замена E_0 на E , не изменяет хода волновой функции при $r < R$, а следовательно, не изменяет и граничного условия (3.1).

Таким образом, глубокая потенциальная яма описывается величиной $\frac{d \ln \chi}{dr}$ на границе ямы, что является одним из свойств у. Ш.

Иными словами, точечное взаимодействие в квантовой механике описывается одним числом — значением логарифмической производной волновой функции в нуле *). То же самое относится к случаю двух частиц, взаимодействующих друг с другом точечным образом, поскольку эта задача сводится к задаче одной частицы с приведенной массой $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

Рассмотрим теперь общее решение у. Ш. при $E > 0$

$$\chi(r) = A \sin(kr + \delta(k)). \quad (3.2)$$

При отсутствии потенциальной ямы следовало бы поставить условие $\chi(0) = 0$, откуда $\delta = 0$.

При наличии потенциальной ямы условие сшивания решения (3.2) с решением внутри ямы дает

$$\frac{d \ln \chi}{dr} \Big|_{r=0} = k \operatorname{ctg} \delta = -\kappa, \quad \delta = \operatorname{arctg} \left(-\frac{\kappa}{k} \right). \quad (3.3)$$

*) С математической точки зрения задание логарифмической производной определяет самосопряженное расширение оператора H ; подробности см. в Приложении А. Читателя, интересующегося этой стороной вопроса, мы отсылаем к работе Ф. А. Березина и Л. Д. Фаддеева (1961).

Из линейности у. Ш. вытекает наличие, как говорят математики, группы — возможности умножить решение на константу (причем решение остается решением) — это позволяет понизить порядок у. Ш. и перейти к нелинейному уравнению первого порядка. При этом удобно написать уравнение именно для $z = \frac{d \ln \chi}{dr}$.

Замечаем, что

$$\frac{d\chi}{dr} = z\chi, \quad \frac{d^2\chi}{dr^2} = \left(\frac{dz}{dr} + z^2\right)\chi$$

и, следовательно, у. Ш. преобразуется к виду

$$\frac{dz}{dr} + z^2 - V(r) = -k^2, \quad (3.4)$$

причем интересующее нас регулярное решение с $\chi(0) = 0$ отличается тем, что при $r \rightarrow 0$, $\chi(r) \rightarrow Cr$ и $z \rightarrow \frac{1}{r}$.

Эта возможность перехода к уравнению первого порядка является общим свойством у. Ш. *).

Особенность задачи о сингулярном потенциале, т. е. о глубокой и узкой яме, заключается в том, что внутри ямы можно пренебречь k^2 и решать уравнение

$$\frac{dz}{dr} + z^2 - V(r) = 0, \quad (3.5)$$

находить z на краю ямы (т. е. $z(R)$), которое определяет решение вне потенциала и при этом в случае $V \rightarrow \infty$, $R \rightarrow 0$ включение k^2 в уравнение не влияет на $z(R)$.

Как уже говорилось, необходимо точное выполнение определенного условия, наложенного на $V(r)$, чтобы при подобном углублении и сужении ямы, т. е. при переходе $V \rightarrow V_1(r)$, $V_1(r) = \alpha^2 V(\alpha r)$, энергия связи $-E$ (а следовательно, и $z(R)$) оставалась конечной. В явном виде это условие не написано, оно формулируется лишь как условие, налагаемое на решение у. Ш. Если это условие не выполнено, то $|E| \rightarrow \infty$, $z(R) \rightarrow \infty$ при $\alpha \rightarrow 0$.

*) В некоторых случаях такой переход оказывается полезным. В частности, это иногда облегчает задачу нахождения фаз рассеяния по известному потенциалу $U(r)$ (Ф. С. Лось, 1957).

Величину $a = -\frac{1}{z} \Big|_{r=R}$ называют длиной рассеяния *).

Мы видели выше, что если связанное состояние существует, то $z < 0$. Длина рассеяния в этом случае положительна. Она отрицательна, если связанного состояния нет.

Вся развитая выше теория относится не только к нижнему уровню: в принципе возможна ситуация, когда нижний уровень (волновая функция χ_1) лежит весьма глубоко, $E \sim U$, а «резонансным», близким к свободным состояниям, является, например, второй уровень χ_2 . Соответствующий ход волновых функций показан на рис. 2.

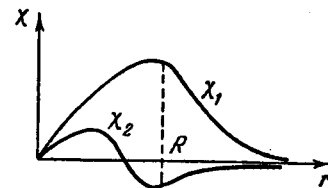


Рис. 2.

В принципе возможен также и резонанс в состоянии $l \neq 0$. В этом случае всегда есть более низкий уровень с $l = 0$. Заметим, что в случае $l \neq 0$ зависимость фазы рассеяния от E и зависимость E от $(|U| - U_1)$ отличаются от приведенных выше формул, относящихся к $l = 0$. См. добавление на стр. 532 о ситуации при наличии потенциального барьера.

Два наиболее важных случая, когда с хорошей точностью можно заменить истинный потенциал $U(r)$ предельным случаем $U \rightarrow \infty$, $R \rightarrow 0$, относятся к ядерной физике. Существует взаимодействие нейтрона с протоном при $l = 0$, которое при параллельных спинах дает связанное состояние (ядро дейтона) с энергией связи 2,2 Мэв. Это состояние можно описать с помощью

*) Это понятие было введено Э. Ферми (1936). Длину рассеяния можно определить также, зная асимптотику волновой функции с нулевой энергией: при $r \rightarrow \infty$, $\chi \sim C(r - a)$. Заметим, что если потенциал $V(r)$ при $r \rightarrow \infty$ падает степенным образом $V(r) \sim r^{-s}$, то для существования длины рассеяния необходимо, чтобы $s > 3$. Следующий член разложения формулы (3.3) по k^2 определяет так называемый эффективный радиус r_0 ($k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2$, Л. Д. Ландау, Я. А. Смородинский, 1944). Для существования r_0 при $l = 0$ достаточно, чтобы $s > 5$ (Т. О'Маллей, Л. Шпрух, Л. Розенберг, 1961).

потенциальной ямы, глубина которой U_0 имеет порядок 36 Мэв при радиусе ямы $R = 2 \cdot 10^{-13}$ см. Второй случай, взаимодействие протона и нейтрона с антипараллельными спинами, отличается тем, что $z > 0$. Связанного состояния в этом случае нет. Величина $\hbar^2 z^2 / 2m$, которую называют энергией виртуального уровня, равна 0,07 Мэв. Параметры соответствующей ямы: $U_0 \approx 13$ Мэв, $R \approx 2,5 \cdot 10^{-13}$ см. Таким образом, при рассеянии нейтронов с энергией до 1 Мэв на протонах теория точечного взаимодействия прекрасно применима.

Возникает вопрос: нельзя ли описать с помощью точечного взаимодействия систему трех частиц?

Переход к случаю трех частиц, взаимодействующих точечным образом, оказывается, однако, далеко не тривиальной задачей. В этом случае двухчастичное взаимодействие уже не определяет полностью трехчастичную задачу (Г. С. Данилов, 1961; Р. А. Минлос, Л. Д. Фаддеев, 1961А). Энергия связанного состояния трех частиц может быть задана произвольно, причем система имеет бесконечное число уровней, энергия которых стремится к $-\infty$. Это значит, что точечное взаимодействие для системы трех частиц является недопустимой идеализацией. Более подробно система трех частиц описана в гл. X.

В отличие от этого, в одномерном случае задача трех и большего числа частиц с точечным взаимодействием полностью определяется двухчастичным взаимодействием, а в случае одинаковых частиц даже допускает явное решение (Ф. А. Березин и др. 1964; Дж. Мак-Гир 1964; Чж. Н. Янг, 1968).

§ 4. Частица в поле нескольких точечных потенциалов

В предыдущем параграфе мы видели, что задачу о движении частицы в поле δ -потенциала можно сформулировать на языке граничных условий, накладываемых на волновую функцию в точке $r = 0$. Общее выражение для решения у. Ш. при малых r и $l = 0$ имеет, как известно, вид

$$\psi = \alpha + \frac{\beta}{r}, \quad \chi = r\psi = \alpha r + \beta. \quad (4.1)$$

При рассмотрении гладких потенциалов постоянная β полагается равной нулю. В случае точечного потенциала это уже не так, и граничное условие теперь сводится к определенной связи между постоянными α и β :

$$\frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dr} \Big|_{r=0} = \frac{\alpha}{\beta} = z, \quad (4.2)$$

где z характеризует свойства потенциала.

Такая формулировка очень удобна для решения задач с несколькими потенциалами.

Рассмотрим, например, случай двух потенциальных ям с заданным z , расположенных в точках r_1 и r_2 . При заданной энергии $E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$ ищем решение в виде

$$\psi = \frac{e^{-\kappa|r-r_1|}}{|r-r_1|} + \frac{e^{-\kappa|r-r_2|}}{|r-r_2|} \quad (4.3)$$

Вблизи $r = r_1$ имеем, вводя обозначение $r_{12} = |r_1 - r_2|$ и раскладывая первую экспоненту в ряд:

$$\psi = \frac{1}{|r-r_1|} - \kappa + \frac{e^{-\kappa r_{12}}}{r_{12}}. \quad (4.4)$$

Следовательно,

$$z = \frac{e^{-\kappa r_{12}}}{r_{12}} - \kappa. \quad (4.5)$$

Это трансцендентное относительно κ уравнение позволяет определить энергию связи частицы в поле двух ям. В частности, мы видим, что при $z > 0$ (т. е. в случае ямы, которая одна не может связать частицу), две ямы на достаточно близком расстоянии дают связанное состояние; критическое условие: при $\kappa = 0$ $r_{12} = \frac{1}{z}$.

Рассмотрим далее случай *бесконечного числа ям*, распределенных в пространстве с плотностью ρ ям на кубический сантиметр.

*) Аналогичная волновая функция использовалась при решении задачи рассеяния π -мезонов на дейтоне в импульсном приближении (К. Бракнер, 1953), а также в задачах столкновения отрицательного иона с нейтральным атомом (О. Б. Фирсов, Б. М. Смирнов, 1964; Ю. Н. Демков, 1965).

Аналогично случаю двух ям пишем:

$$\psi = \sum_i \frac{e^{-\kappa|r-r_i|}}{|r-r_i|}. \quad (4.3')$$

Величина κ определяется из условия

$$z = -\kappa + \sum_i \frac{e^{-\kappa r_{1i}}}{r_{1i}}. \quad (4.5')$$

Заменим сумму интегралом, полагая, что $1/\kappa$ много больше расстояния до ближайшего соседа $1/\kappa \gg \rho^{-1/3}$:

$$z = -\kappa + \rho \int \frac{e^{-\kappa r}}{r} dr = -\kappa + 4\pi\rho \frac{1}{\kappa^2}. \quad (4.6)$$

Это уравнение, в отличие от предыдущего случая двух ям, имеет решение с $\kappa > 0$ всегда, при любых ρ и z . Условие $1/\kappa \gg \rho^{-1/3}$ позволяет пренебречь κ по сравнению с $4\pi\rho/\kappa^2$. Таким образом, получаем

$$\kappa^2 = 4\pi\rho \frac{1}{z}, \quad E = -4\pi\rho \frac{1}{z} \frac{\hbar^2}{2m}, \quad (4.7)$$

причем условие $1/\kappa \gg \rho^{-1/3}$ принимает теперь вид $1/z \ll \rho^{-1/3}$. Весь расчет относится к случаю $z > 0$, когда в случае одной ямы связанный уровень отсутствует.

Мы видим, что система ям с данной плотностью приводит к появлению состояния с отрицательной энергией. Эта энергия — такая же, как если бы каждая яма была заменена медленно меняющимся (по сравнению с расстоянием между ямами) потенциалом $\tilde{U}(r)$, подчиненным условию

$$\int \tilde{U}(r) dr = -4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{z}.$$

Тогда потенциал в каждой точке, имеющий вид $\sum_i \tilde{U}(r-r_i)$, был бы постоянен по всему объему и равнялся бы

$$\tilde{U} = -4\pi\rho \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{z}. \quad (4.8)$$

Той же величине равнялась бы и энергия покоящейся частицы в поле этого потенциала.

Это есть способ нахождения так называемого *псевдопотенциала* *), медленно меняющегося, и малого потенциала (к которому уже применима теория возмущений), действующего на частицу так же, как сингулярная яма.

Подчеркнем то обстоятельство, что псевдопотенциал \tilde{U} не может быть получен путем простого усреднения потенциала $U(r)$: $U_{cp} = \rho \int_{V_0} U dr$. Так, в случае притя-

жения ($U < 0$) псевдопотенциал оказывается больше среднего значения потенциала, $|\tilde{U}| > |U_{cp}|$, что объясняется увеличением вероятности нахождения частицы в той области, где потенциал отличен от нуля. Этот факт особенно ярко проявляется, когда $U \sim \frac{\text{const}}{R^2}$ при $R \rightarrow 0$. Тогда $U_{cp} = \text{const} \cdot \rho R \rightarrow 0$, в то время как псевдопотенциал \tilde{U} к нулю не стремится. В случае же отталкивания ($U > 0$) $|\tilde{U}| < |U_{cp}|$ и в пределе $U \rightarrow \infty$, $R \rightarrow 0$, $z \rightarrow 1/R$, $\tilde{U} \sim \text{const} R \rightarrow 0$, тогда как при $U = \text{const} \cdot \frac{1}{R^N}$ и $N > 3$ предельное значение

$$U_{cp} = \text{const} \cdot \rho \frac{1}{R^{N-3}} \rightarrow \infty.$$

Используя понятие псевдопотенциала, нетрудно найти показатель преломления вещества.

Пусть частица с небольшой, но конечной энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ попадает из вакуума в среду, которая характеризуется псевдопотенциалом \tilde{U} (см. формулу (4.8)). Найдем значение кинетической энергии T частицы внутри вещества:

$$T = E - \tilde{U} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(1 + \frac{4\pi\rho}{k^2} \frac{1}{z} \right) = \frac{(\hbar k n)^2}{2m}.$$

Отсюда получаем формулу для показателя преломления вещества:

$$n^2 = 1 + \frac{4\pi\rho}{k^2} \frac{1}{z} = 1 - \frac{4\pi\rho}{k^2} a. \quad (4.9)$$

*) Это понятие было введено Э. Ферми (1936). Вопрос о применимости теории возмущений подробно разбирается на стр. 107 книги Г. Бете (1948) и в работе Г. Брейта (1947).

Отметим, что яма, в которой нет уровня (например, $U > 0$), приводит все же к эффективному притяжению; соответствующий псевдопотенциал при этом всегда отрицателен, причем величина z при $U \rightarrow \infty$ и фиксированном R монотонно стремится к $1/R$.

Напротив, яма, в которой уровень только что появился, может удержать частицу на этом уровне. Но на те частицы, которые не связаны, она действует как центр отталкивания, ее псевдопотенциал положителен. Это приводит, например, к отражению нейтронов при достаточно малой энергии от поверхности графита или бериллия, притом при любом угле падения, вплоть до нормального к поверхности. Этот эффект дает любопытную возможность хранить холодные нейтроны в сосуде с графитовыми стенками (Я. Б. Зельдович, 1959А)*).

Заметим, что поскольку при увеличении глубины ямы при фиксированном ее радиусе величина z обращается в $-\infty$, затем в $+\infty$ и уменьшается, обращаясь в нуль, в момент возникновения второго уровня, то отсюда следует, что при изменении глубины ямы псевдопотенциал осциллирует.

§ 5. Кулоновский потенциал

Теория частицы, находящейся в кулоновском поле, развита во всех подробностях и содержится во всех учебниках. Отметим особо монографию Г. Бете и Э. Солпитера (1957), содержащую много справочного материала, а также результаты работ до 1957 г. включительно.

Поэтому в предлагаемом параграфе речь пойдет не о новых результатах, а о несколько ином освещении фактов, которые сами по себе известны.

В нерелятивистском приближении, т. е. без учета релятивистских поправок, спина электрона и высших приближений квантовой электродинамики, гамильтониан электрона, находящегося в кулоновском поле ядра с зарядом Ze , имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r}, \quad (5.1)$$

*) В последнее время эффект отражения холодных нейтронов от поверхности меди был обнаружен экспериментально (Ф. Л. Шапиро, 1969).

а энергия уровней дается формулой

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{E_0}{2n^2}; \quad (5.2)$$

здесь

$$E_0 = \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2} = 27 Z^2 \text{ эв.}$$

Из элементарной теории известно, что уровни атома водорода вырождены: при данном n имеются уровни с l от 0 до $n-1$; энергия этих уровней, имеющих различные l , одинакова. Это обстоятельство называют «случайным» вырождением*), поскольку в общей теории произвольного сферически-симметричного потенциала такого вырождения быть не должно.

Рассмотрим те новые эффекты, к которым приводит случайное вырождение. Как известно, с этим связано, например, явление линейного штарк-эффекта у водородных атомов: возбужденные атомы водорода, т. е. атомы в состоянии с данным $n > 1$, в электрическом поле могут иметь различную энергию, т. е. образуют мультиплет, причем расщепление энергии пропорционально электрическому полю \mathcal{E} :

$$E = -\frac{E_0}{2n^2} + ka|\mathcal{E}|, \quad (5.3)$$

где k меняется в пределах от $-(n-1)$ до $(n-1)$. Так, например, при $n=2$ уровень расщепляется на три подуровня.

Линейная зависимость E от $|\mathcal{E}|$ означает, что возбужденные атомы водорода имеют электрический дипольный момент: энергия нейтрального тела с дипольным моментом d в электрическом поле \mathcal{E} равна $-d\mathcal{E}$.

*) В отличие от вырождения уровней с данным l и различными m , которое следует из инвариантности у. Ш. относительно трехмерных вращений. Вывод из теории групп формулы (5.2) и некоторых следствий «случайного» вырождения приводится ниже. Заметим здесь же, что введение дополнительного короткодействующего потенциала, эквивалентное, согласно § 3, изменению граничного условия при $r=0$, снимает это вырождение. Дискретный спектр в кулоновской задаче с общим граничным условием рассматривался в работах Я. Б. Зельдовича (1959Б), А. М. Переломова и др. (1966) и А. И. Никишова и В. И. Ригуса (1967).

Раньше, в § 1, в общем виде было доказано, что атом не может иметь дипольного момента. В чем же дело? Состояния с определенным l в кулоновском потенциале не имеют дипольного момента. Отличие здесь заключается в том, что благодаря случайному вырождению мы имеем, например, $E_{20} = E_{21} = E_2$ (первый индекс — главное квантовое число, второй индекс — l). Поэтому суперпозиция решений с разными l , но одинаковыми n , также является решением, отвечающим данному значению E_n . Рассмотрим, например, состояния

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,0,0} + \psi_{2,1,0}) \text{ и } \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,0,0} - \psi_{2,1,0})^* \quad (5.4)$$

Это — состояния с энергией, равной E_2 , и с дипольными моментами, направленными по оси z и равными $+3ea$ и $-3ea$ у первого и у второго соответственно. Наконец, $\psi_{2,1,1}$ и $\psi_{2,1,-1}$, а также любые их суперпозиции (линейные комбинации) суть два состояния с энергией E_2 и дипольным моментом, равным нулю.

Таким образом, из четырех вырожденных состояний (одно $2S$ и три $2P$) можно построить, притом в отсутствие электрического поля, два состояния с дипольным моментом и два состояния без дипольного момента с той же энергией.

В электрическом поле уровень с $n = 2$, следовательно, расщепляется на три уровня.

Состояния с дипольным моментом не обладают определенной четностью, поскольку они являются суперпозициями состояний с противоположной четностью.

При потенциале, отличном от кулоновского, можно взять суперпозицию двух решений с разными l , но у этих решений будут и различные энергии. Поэтому волновая

*) Такие состояния возникают при решении у. Ш. для потенциала Кулона в параболических координатах. Заметим, что разделение переменных в этом случае возможно также в эллиптических координатах. Эта возможность разделения переменных в различных системах координат является одним из следствий случайного вырождения; при этом различные системы координат соответствуют возможности различного выбора полной системы коммутирующих с гамильтонианом и между собой операторов.

функция, зависящая от времени, здесь имеет вид (индекс указывает l)

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}) e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} + \psi_1(\mathbf{r}) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \quad (5.5)$$

При $E_1 \neq E_0$ дипольный момент, вычисленный с такой волновой функцией, осциллирует с периодом, равным $\frac{2\pi\hbar}{E_1 - E_0}$, а средний по времени дипольный момент тождественно равен нулю.

Легко понять с позиций классической механики, почему именно кулоновский потенциал приводит к возможности существования дипольного момента.

Классические орбиты в кулоновском потенциале — это кеплеровы эллипсы, причем заряд, создающий потенциал, находится в фокусе эллипса (рис. 3). К тому же в точке наибольшего удаления электрон движется медленнее, чем в самой близкой к протону точке. Очевидно, что при кеплеровом движении электрона в среднем по времени водородный атом имеет дипольный момент; усредненное по времени положение электрона \mathbf{r} соответствует точке на большой полуоси посередине между центром и вторым фокусом эллипса.

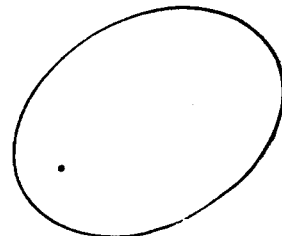


Рис. 3.

Возьмем теперь случай потенциала, отличающегося от кулоновского; так, например, отличается от кулоновского потенциал ядра и 10 внутренних электронов натрия — тот потенциал, в котором движется одиннадцатый внешний валентный электрон натрия. В некулоновском поле классическая орбита представляет собой незамкнутую кривую*) (рис. 4), т. е. как бы эллипс с постоянно

*) Заметим, что, согласно теореме Ж. Бертрана (1873), в трехмерном случае кулоновский потенциал и потенциал гармонического осциллятора — это единственные сферически-симметричные потенциалы, для которых орбиты являются замкнутыми кривыми. (См. в связи с этим интересные замечания П. Эренфеста (1920) о выделенности случая трехмерного пространства по сравнению с другими случаями.)

поворачивающейся большой осью. Эта классическая картина вполне соответствует квантовому результату: дипольный момент осциллирует и в среднем по времени равен нулю.

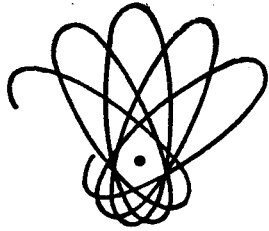


Рис. 4.

Четыре волновые функции с $n = 2$ можно выбрать и иначе, так чтобы каждое из четырех ортогональных состояний имело один и тот же по величине дипольный момент, а направления вектора дипольного момента соответствовали четырем вершинам тетраэдра, в центре которого находится ядро*).

Пусть l_i ($i = 1, 2, 3, 4$) — четыре единичных трехмерных вектора, направленных из центра тетраэдра в его вершины: $l_i l_j = \frac{4}{3} \delta_{ij} - \frac{1}{3}$. Введем также следующие обозначения:

$$\psi_0 = \psi_{2,0,0}, \quad \psi = (\psi_x, \psi_y, \psi_z), \quad \psi_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1}),$$

$$\psi_y = \frac{1}{\sqrt{2i}} (\psi_{2,1,1} - \psi_{2,1,-1}), \quad \psi_z = \psi_{2,1,0}.$$

Тогда, как нетрудно видеть, четыре функции

$$\psi_i = \frac{1}{2} (\psi_0 + \sqrt{3} l_i \psi) \quad (5.6)$$

и будут обладать указанными выше свойствами. Эти волновые функции (так называемые σ -электроны) являются нулевым приближением при рассмотрении химической связи атома углерода с другими атомами.

Атом углерода имеет как раз четыре электрона с $n = 2$. Как известно из органической химии, валентные связи углерода действительно направлены по вершинам тетраэдра (Ч. Коульсон, 1952). Если $n = 3$, то электроны

*) Эти соображения были использованы при построении модели адрона, состоящего из антикварка и четырех кварков. В этой модели антикварк находится в центре, а четыре кварка занимают нижние четыре орбиты, что эффективно соответствует их расположению в четырех вершинах тетраэдра (Я. Б. Зельдович, А. Д. Сахаров, 1966).

могут находиться в состояниях s ($l = 0$), p ($l = 1$) и d ($l = 2$). Все возможные системы волновых функций, обладающие геометрической симметрией, были построены в этом случае в работах Дж. ван Флека и А. Шермана (1935) и Дж. Кимбалла (1940). (См. книгу: Г. Эйринг, Дж. Уолтер, Дж. Кимбалл (1946).) Мы здесь отметим лишь, что для конфигураций электронов sd^3 , sp^3d^2 и sp^3d^4 соответствующие системы волновых функций обладают симметрией тетраэдра, октаэдра и додекаэдра.

Перейдем теперь к выводу формулы (5.2), причем приведем здесь не совсем обычный, чисто алгебраический способ получения E_n *). Отметим, что примерно таким путем эта формула и была получена В. Паули (1926) еще до установления у. Ш.

Прежде всего напомним, что (как известно из классической механики) в кулоновском поле, помимо вектора момента количества движения, существует еще один сохраняющийся вектор, направленный по большой полуоси эллипса, — так называемый вектор Рунге — Ленца (К. Рунге, 1919; В. Ленц, 1924)**):

$$\mathbf{A} = -\sqrt{m} \left(-\alpha \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{m} [\mathbf{pL}] \right), \quad \alpha = \frac{Ze^2}{\hbar}. \quad (5.7)$$

Нетрудно убедиться в том, что оператор

$$\hat{\mathbf{A}} = -\sqrt{m} \left(-\alpha \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{2m} ([\mathbf{pL}] - [\mathbf{Lp}]) \right) \quad (5.8)$$

коммутирует с гамильтонианом $[\hat{\mathbf{A}}, H] = 0$, и потому оператор $\hat{\mathbf{A}}$ является обобщением вектора \mathbf{A} на случай квантовой механики. Перестановочные соотношения для операторов L_i и A_j имеют вид

$$\left. \begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\epsilon_{ijk} L_k, & [L_i, A_j] &= i\epsilon_{ijk} A_k, \\ [A_i, A_j] &= -2i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \end{aligned} \right\} \quad (5.9)$$

Рассмотрим теперь состояния с фиксированной отрицательной энергией. Для этих состояний мы можем считать $H = E$ постоянным отрицательным числом и ввести

*) Читатель, которому нижеследующие рассуждения покажутся сложными, может опустить оставшуюся часть этого параграфа.

***) Отметим, что этот интеграл движения был известен еще П. Лапласу (1829).

вместо A_i операторы $N_i = (-2H)^{-1/2} A_i$. Соотношения (5.9) принимают теперь вид перестановочных соотношений для генераторов группы вращений четырехмерного евклидова пространства — группы $O(4)$ (Л. Хюльтен, 1933)*.

$$\left. \begin{aligned} [L_i, L_j] &= i\epsilon_{ijk} L_k, & [L_i, N_j] &= i\epsilon_{ijk} N_k, \\ [N_i, N_j] &= i\epsilon_{ijk} L_k. \end{aligned} \right\} \quad (5.9')$$

Отметим следующие важные тождества, которым удовлетворяют величины L_i и N_j :

$$LN = NL = 0, \quad L^2 + N^2 + 1 = -\frac{E_0}{2H}, \quad E_0 = \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2}. \quad (5.10)$$

Теперь удобно ввести два новых векторных оператора

$$J^{(1)} = \frac{1}{2}(L + N), \quad J^{(2)} = \frac{1}{2}(L - N), \quad (5.11)$$

каждый из которых имеет те же перестановочные соотношения, что и операторы момента количества движения для группы вращений трехмерного пространства — группы $O(3)$, причем между собой $J^{(1)}$ и $J^{(2)}$ коммутируют:

$$\left. \begin{aligned} [J_i^{(1)}, J_j^{(1)}] &= i\epsilon_{ijk} J_k^{(1)}, & [J_i^{(2)}, J_j^{(2)}] &= i\epsilon_{ijk} J_k^{(2)}, \\ [J_i^{(1)}, J_j^{(2)}] &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (5.9'')$$

Отсюда следует, что собственные значения $(J^{(1,2)})^2$ равны $j_{1,2}(j_{1,2} + 1)$, а в силу (5.10)

$$(J^{(1)})^2 = (J^{(2)})^2 = \frac{L^2 + N^2}{4} = j(j+1), \quad E = H = -\frac{E_0}{2(2j+1)^2}. \quad (5.12)$$

Сравнивая (5.12) и (5.2), находим

$$n = 2j + 1, \quad j = j_1 = j_2 = \frac{n-1}{2}. \quad (5.12')$$

Из приведенных выше рассуждений следует также, что кратность вырождения равна $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = (2j + 1)^2 = n^2$.

Известно также, что трансформационные свойства функций относительно группы $O(4)$ полностью опреде-

* В n -мерном случае соотношения типа (5.9) и (5.9') принимают вид перестановочных соотношений для генераторов группы $O(n+1)$ (Г. Дьерди, Я. Ревай, 1965).

ляются заданием чисел j_1 и j_2 — собственных значений операторов $(J^{(1)})^2$ и $(J^{(2)})^2$ (или операторов $L^2 + N^2$ и LN). Если j_1 и j_2 заданы, то говорят, что функции преобразуются по представлению $D(j_1, j_2)$ группы $O(4)$. В нашем случае волновые функции при фиксированном значении $E = E_n$ преобразуются по представлению $D\left(\frac{n-1}{2}, \frac{n-1}{2}\right)$.

Как уже упоминалось ранее, в случае вырождения при фиксированной энергии $E < 0$ можно рассматривать различные системы волновых функций. Так, например, в случае обычной системы волновых функций, связанной с разделением переменных в сферической системе координат, эти функции $\psi_{nlm}(r)$ являются собственными функциями операторов H , L^2 и L_z . Можно, однако, рассмотреть собственные функции операторов H , $J_z^{(1)}$ и $J_z^{(2)}$. Оказывается, что эти функции $\psi_{n k_1 k_2}$ появляются при разделении переменных в у. Ш. в параболической системе координат (В. Баргманн, 1935), при этом k_1 и k_2 следующим образом связаны с числами n_1 и n_2 , которые обычно употребляются при рассмотрении параболических координат:

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{1}{2}(m + n_1 - n_2), & k_2 &= \frac{1}{2}(m - n_1 + n_2), \\ -k &\leq k_1, & k_2 &\leq k, & k &= \frac{n-1}{2}; & n_1 + n_2 + |m| + 1 &= n. \end{aligned}$$

Поскольку $L = J^{(1)} + J^{(2)}$, то тем самым переход от одного способа описания к другому сводится к хорошо известной задаче сложения двух моментов количества движения $j_1 = j_2 = \frac{n-1}{2} = k$. Складывая эти моменты, находим, что при данном n величина l принимает значения от 0 до $n-1$. Нетрудно видеть также, что связь между функциями ψ_{nlm} и $\psi_{n k_1 k_2}$ имеет вид (Д. Парк, 1960)

$$\left. \begin{aligned} \psi_{nlm} &= \sum_{k_1+k_2=m}^{2k} (k k_1, k k_2 | l m) \psi_{n k_1 k_2}, \\ \psi_{n k_1 k_2} &= \sum_{l=|m|}^{2k} (k k_1, k k_2 | l m) \psi_{nlm}, \end{aligned} \right\} \quad (5.13)$$

где числа $(j_1 m_1, j_2 m_2 | j m)$ суть обычные коэффициенты Клебша — Гордана *).

Итак, мы установили, что у Ш. инвариантно относительно группы 4-мерных вращений и что эта инвариантность полностью объясняет вырождение уровней. Поэтому термин «случайное» вырождение с нашей точки зрения следует признать не вполне удачным.

До сих пор наше рассмотрение было несколько формальным и к тому же не давало возможности определить явный вид волновых функций.

Преобразуем сейчас у Ш., как это было впервые сделано В. А. Фоком (1935), к виду, инвариантному относительно группы $O(4)$. У Ш. в импульсном представлении имеет вид

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) \psi(p) - \frac{Ze^2}{2\pi^2 \hbar} \int \frac{\psi(p') dp'}{|p-p'|^2} = 0. \quad (5.14)$$

Будем рассматривать импульсное пространство как стереографическую проекцию четырехмерной сферы, т. е. введем новые переменные

$$\xi_0 = \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2}, \quad \xi = \frac{2p_0 p}{p_0^2 + p^2}, \quad \xi_0^2 + \xi^2 = 1, \\ p_0 = \sqrt{2m|E|}, \quad E = -\frac{p_0^2}{2m}. \quad (5.15)$$

Переходя также к новой функции

$$\psi(\xi) = (p^2 + p_0^2)^2 \psi(p), \quad (5.16)$$

получаем уравнение

$$\psi(\xi) - \frac{\eta}{2\pi^2} \int \frac{d\xi'}{\xi_0} \frac{\psi(\xi')}{(\xi - \xi')^2} = 0, \quad \eta = \frac{am}{p_0}. \quad (5.17)$$

Но это уравнение, как заметил Фок, есть не что иное, как уравнение для четырехмерных сферических функ-

*) Переходя в (5.13) к положительным энергиям $E > 0$, получаем выражение кулоновской амплитуды рассеяния через коэффициент Клебша — Гордана с комплексными значениями k_1, k_2 (А. М. Переломов, В. С. Попов, 1968).

ций $Y_{nlm}(\xi)$, и потому собственные значения параметра η равны n^*).

Таким образом, мы получили следующий результат: волновые функции кулоновской задачи имеют вид

$$\psi_{nlm}(p) = C_{nlm} (p^2 + p_0^2)^{-2} Y_{nlm}(\xi) \quad (5.18)$$

(здесь C_{nlm} — нормировочная постоянная).

Замечательным здесь является тот факт, что волновые функции дискретного спектра оказались пропорциональными четырехмерным сферическим функциям, теория которых, так же как и теория сферических функций n -мерного пространства, хорошо разработана. Мы не будем здесь выписывать явного вида этих функций, отсылая интересующегося читателя к монографиям (Г. Бейтман, А. Эрдейи, Т. 2; 1953В; Н. Я. Виленкин, 1965).

Заметим лишь, что использование волновых функций в виде (5.18) дает возможность получить явные выражения для некоторых сумм, встречающихся в теории атома (В. А. Фок, 1935), и найти изящное представление кулоновской функции Грина для случая $E < 0$ (Ю. Швингер, 1964). Аналогичными, хотя и несколько более сложными свойствами, обладают и функции непрерывного спектра.

Существенное отличие от случая дискретного спектра заключается здесь в том, что вместо четырехмерной сферы приходится иметь дело с четырехмерным двуполостным гиперболоидом, а вместо конечномерных представлений группы $O(4)$ — с бесконечномерными унитарными представлениями группы Лоренца. Детальное рассмотрение случая непрерывного спектра можно найти в работах А. М. Переломова, В. С. Попова (1966), М. Бандера, К. Ицксона (1966). Заметим также, что симметрия, аналогичная рассмотренной выше, имеет место и для кулоновского потенциала в n -мерном пространстве (С. П. Аллилуев, 1957; А. М. Переломов, В. С. Попов, 1966; М. Бандер, К. Ицксон, 1966).

*) Отсюда видно, что в случае притяжения ($\eta > 0$) $E_n = -\frac{a^2 m}{2n^2}$, а в случае отталкивания ($\eta < 0$) связанные состояния отсутствуют.

§ 6. Трехмерный осциллятор

Рассмотрим потенциал

$$U(r) = \frac{kr^2}{2}, \quad (6.1)$$

где $k > 0$. Этот потенциал не стремится к определенному пределу при $r \rightarrow \infty$ и потому в реальных физических задачах осуществляется только приближенно, при каких-то не слишком больших r ; дальше он неизбежно отклоняется от (6.1).

Тем не менее его можно использовать в тех случаях, когда большие значения r несущественны, например для описания слабозбужденных уровней ядра в модели оболочек (см. обзор: Дж. Эллиот, А. Лейн (1957)) и коллективной модели ядра (Дж. Эллиот, 1958; В. Баргманн, М. Мошинский, 1960, 1961).

Важным свойством этого потенциала, которое справедливо и в одномерном случае, является эквидистантность уровней. Это обстоятельство дает возможность провести аналогию между возбужденным состоянием одного осциллятора с энергией $(n + 1/2)\hbar\omega$ и состоянием системы из n тождественных частиц, энергия каждой из которых равна $\hbar\omega$. На основе этой аналогии развит так называемый «метод вторичного квантования», позволяющий рассматривать процессы, в которых число частиц может изменяться. В частности, оказывается, что многие свойства электромагнитного излучения в рамках квантовой механики совпадают со свойствами ансамбля осцилляторов.

Заметим также, что изучение системы большого числа частиц с двумя уровнями (такая система обычно используется в теории лазера) также может быть сведено к изучению эквидистантной системы, а именно, спина, находящегося в однородном магнитном поле (Р. Дике, 1954). Уровни энергии такой системы, также как и уровни в кулоновском потенциале, вырождены.

Мы рассмотрим это «случайное» вырождение на примере трехмерного осциллятора. Будем искать решение у. Ш. с потенциалом (6.1) в виде

$$\psi(r) = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_3(x_3). \quad (6.2)$$

Тогда каждая из этих функций удовлетворяет одномерному у. Ш. с потенциалом осциллятора. Полная энергия складывается из энергии движения по каждой координате

$$E = E_1 + E_2 + E_3, \quad E_i = \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (6.3)$$

Таким образом, уровни энергии трехмерного сферически симметричного осциллятора вырождены. Общее выражение энергии

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega,$$

где n — целое. Степень вырождения, т. е. число линейно независимых решений с данной энергией равно числу способов, которыми целое число n можно разбить на три неотрицательных целых числа. Построим равносторонний треугольник, ребро которого равно n единиц, и проведем в нем сетку линий, разбивающую треугольник на треугольнички с единичным ребром. Расстояние каждого узла от стороны большого треугольника равно целому числу высот единичного треугольника. Сумма этих трех целых чисел равна n . Следовательно, степень вырождения N равна полному числу узлов, включая узлы, расположенные на сторонах большого треугольника (для них одно из трех чисел равно нулю) и в его вершинах (два нуля, третье число равно n). Полное число узлов, как легко сообразить, равно

$$N = \frac{(n+1)(n+2)}{2}. \quad (6.4)$$

Согласно общей теории уровни в сферически-симметричном потенциале $U = kr^2/2$ можно классифицировать по орбитальному моменту l и его проекции m .

Состояние, заданное в форме (6.2) тремя числами n_1, n_2, n_3 , вообще говоря, не имеет определенных l и m .

Поучительно проследить, как линейные комбинации состояний, заданных в форме (6.2), дают состояния с определенными l и m .

При $n = 0$ состояние одно, и легко убедиться, что это состояние с $l = 0$.

При $n = 1$ есть три состояния. Легко убедиться, что их линейные комбинации дадут как раз три состояния с $l = 1$. При этом $\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\psi_1(x_3)$ есть состояние с $l = 1, m = 0$; $\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x_1)\psi_0(x_2) \pm i\psi_0(x_1)\psi_1(x_2)]\psi_0(x_3)$ есть состояние с $l = 1, m = \pm 1$.

При $n = 2$ есть шесть состояний. Нетрудно убедиться в том, что из них можно построить одно состояние с $l = 0$ и пять состояний с $l = 2$ и m , принимающим значения от 2 до -2 .

В общем случае каждому n соответствует полный набор состояний с $l = n, l = n - 2, l = n - 4 \dots$ до $l = 1$ или $l = 0$ в зависимости от четности n . Каждое l при этом встречается один раз.

Таким образом, в трехмерном осцилляторе, так же как и в кулоновском потенциале, имеет место вырождение уровней с различными l , например $l = 2$ и $l = 0$.

Покажем теперь, что в нашем случае, так же как и в случае кулоновского потенциала, у Ш. инвариантно относительно группы преобразований более широкой, нежели группа трехмерных вращений (Дж. Яух, Э. Хилл, 1940; Ю. Н. Демков, 1953; Г. Бейкер, 1956).

Введем операторы *):

$$a_i^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi_i - \frac{\partial}{\partial \xi_i} \right), \quad a_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi_i + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \right),$$

$$\xi_i = \frac{x_i}{x_0}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (6.5)$$

удовлетворяющие перестановочным соотношениям

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0. \quad (6.6)$$

Гамильтониан теперь принимает вид

$$H = \hbar\omega \left[\sum_{i=1}^3 a_i^+ a_i + \frac{3}{2} \right]. \quad (6.7)$$

*) Читатель, знакомый с квантовой теорией поля, узнает в них обычные операторы рождения и уничтожения колебательных квантов.

Нетрудно видеть, что гамильтониан (6.7) инвариантен относительно унитарного преобразования

$$a_i \rightarrow a_i' = \sum_{j=1}^3 u_{ij} a_j, \quad a_i^+ \rightarrow a_i'^+ = \sum_{j=1}^3 u_{ij}^* a_j^+,$$

$$\sum_{k=1}^3 u_{ik} u_{jk}^* = \delta_{ij}, \quad (6.8)$$

или, иными словами, гамильтониан трехмерного осциллятора инвариантен относительно группы унитарных матриц третьего порядка, группы $U(3)$. Нетрудно видеть, что для f -мерного осциллятора соответствующая группа есть группа $U(f)$.

Введем операторы $A_i^l = a_j^+ a_i$. Они коммутируют с гамильтонианом $[A_i^l, H] = 0$ и в то же время удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$[A_i^l, A_k^l] = \delta_i^l A_k^l - \delta_k^l A_i^l. \quad (6.9)$$

Эти соотношения совпадают с известными перестановочными соотношениями для генераторов группы $U(3)$ (Дж. Рака, 1951; М. Хаммермеш, 1962), откуда следует, что величины A_i^l являются генераторами этой группы.

Рассмотрим теперь величину

$$A = \sum_{i=1}^3 A_i^l = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{3}{2}.$$

Очевидно, что A коммутирует с H и всеми A_i^l , выделим поэтому ее из девяти величин A_i^l .

Введем для этого новые операторы

$$B_i^l = A_i^l - \frac{1}{3} \delta_i^l A, \quad \sum_{i=1}^3 B_i^l = 0. \quad (6.10)$$

Эти девять новых величин, из которых только восемь независимы, удовлетворяют прежним перестановочным соотношениям, но в силу тождества $\sum_{i=1}^3 B_i^l = 0$ являются

уже генераторами группы $SU(3)$ — группы унитарных матриц третьего порядка с определителем, равным единице*). Заметим, что обычная группа вращений — группа $SO(3)$ — содержится в ней в качестве подгруппы. Представления группы $SU(3)$ хорошо известны, они полностью характеризуются двумя целыми числами p и q . Однако не все представления этой группы реализуются волновыми функциями осциллятора. Именно, поскольку в нашу задачу входит лишь один сорт операторов a_i , мы можем построить лишь функции типа симметричного тензора. Такие функции преобразуются по представлению $D(p, q)$ с $p = n$, $q = 0$. Кратность вырождения и содержание орбитальных моментов l в состоянии с данной энергией можно было бы поэтому получить и по общим формулам. Однако приведенное на стр. 45 рассуждение достаточно для наших целей.

Заметим, что именно со случайным вырождением связано то обстоятельство, что классическая траектория осциллятора представляет замкнутую кривую — эллипс с центром в начале координат.

Почему связаны между собой замкнутость классической траектории и вырождение уровней с разными l ? Классическая частица, находящаяся в определенной точке, с определенными значениями угловых переменных θ и φ , в квантовой механике описывается волновым пакетом — суперпозицией состояний с различными l . Если вырождения нет, то с течением времени соотношения между фазами состояний с разными l меняются и волновой пакет размывается в соответствии с классической картиной движения по траектории типа рис. 4.

Заметим, что вырождение уровней с разными m при данном l , которое имеет место при любом сферически-симметричном потенциале, соответствует классической теореме о точном сохранении плоскости орбиты.

*) Эта группа использовалась как группа симметрии сильно взаимодействующих частиц (М. Гелл-Манн, 1962; Ю. Немеан, 1961); в связи с этим многие вопросы теории этой группы были успешно разработаны физиками. Аналогия между симметрией сильно взаимодействующих частиц и симметрией осциллятора рассматривалась в интересной статье Ф. Дайсона (1964).

Характерное отличие вырождения в осцилляторе от кулоновского заключается в том, что вырожденные уровни имеют одинаковую четность, равную $(-1)^n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$).

Чтобы убедиться в этом, заметим, что решения одномерной задачи имеют определенную четность, равную $(-1)^n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$).

Из сказанного следует, что в осцилляторе суперпозиция состояний с разными l , но одинаковой энергией, также имеет определенную четность, а следовательно, ее дипольный момент равен нулю, т. е. сконструировать стационарное состояние с $d \neq 0$ невозможно.

Это понятно и при классическом подходе, так как траектория осциллятора симметрична относительно начала координат.

В заключение на примере одномерного осциллятора разберем вопрос о так называемых «когерентных состояниях». Многие важные свойства этих состояний были изучены в фундаментальной работе Р. Глаубера (1963). Подробное рассмотрение свойств таких состояний можно найти в книге Дж. Клаудера и Э. Сударшана (1968).

Чем же примечательны когерентные состояния? Тем, что, как мы увидим ниже, их свойства наиболее близки к свойствам классического осциллятора. Использование этих состояний позволяет естественным образом описать когерентные свойства пучка света (например, лазерного пучка) в рамках квантовой механики. Эти состояния полезны также при рассмотрении излучения мягких квантов (В. Чанг, 1965; Т. Киббл, 1968 А — D).

Пусть осциллятор находится в n -квантовом состоянии и описывается волновой функцией ψ_n . Нам будет удобно, следуя П. Дираку (1930), обозначать это состояние через $|n\rangle$. Такого рода состояния не подходят для перехода от квантовой механики к классической прежде всего потому, что для них средние значения координаты и импульса равны нулю*):

$$x_n(t) = \langle n | \hat{x} | n \rangle = 0, \quad p_n(t) = \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0, \quad (6.11)$$

*) Это есть общее свойство стационарных состояний дискретного спектра.

в то время как в классической механике

$$x(t) = A \cos(\omega t - \varphi). \quad (6.12)$$

Если, однако, $\langle \psi(0) | \hat{x} | \psi(0) \rangle \neq 0$ или $\langle \psi(0) | \hat{p} | \psi(0) \rangle \neq 0$, то, как мы сейчас покажем, $x(t) = \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle$ изменяется по классическому закону (6.12).

Перейдем к гейзенберговскому представлению, т. е. такому представлению, когда зависимость средних значений от времени содержится в операторах, а волновые функции от времени не зависят. Пусть оператор $S(t)$ переводит начальную волновую функцию $\psi(0)$ в волновую функцию $\psi(t)$:

$$\psi(t) = S(t) \psi(0). \quad (6.13)$$

Тогда, как известно, гейзенберговский оператор $A(t)$ определяется формулой

$$A(t) = S^+(t) A S(t) \quad (6.14)$$

и удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \dot{A}(t) = [A(t), H(t)], \quad A(0) = A. \quad (6.15)$$

Выбирая в качестве A оператор уничтожения $a = \frac{\omega x + ip}{\sqrt{2\hbar\omega}}$

($m = 1$), получаем

$$i\dot{a}(t) = \omega a(t), \quad \text{откуда} \quad a(t) = a e^{-i\omega t}. \quad (6.16)$$

Отсюда следуют выражения для операторов $x(t)$ и $p(t)$

$$\left. \begin{aligned} x(t) &= \cos \omega t \cdot x + \frac{\sin \omega t}{\omega} p, \\ p(t) &= -\omega \sin \omega t \cdot x + \cos \omega t \cdot p. \end{aligned} \right\} \quad (6.17)$$

Мы видим, таким образом, что в случае осциллятора гейзенберговские операторы $x(t)$ и $p(t)$, а следовательно, и их средние значения для произвольного начального состояния меняются с течением времени по законам классической механики.

Найдем теперь все состояния, минимизирующие соотношение неопределенностей ($\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$) и потому являющиеся наилучшим приближением к классическому описанию, где переменные x и p полностью локализованы.

С помощью формул (6.17) и определения оператора a нетрудно найти выражения для

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad \Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2: \\ \Delta x^2 &= \frac{\hbar}{\omega} \left[(\langle a^+ a \rangle - \langle a^+ \rangle \langle a \rangle + \frac{1}{2}) + \right. \\ &\quad \left. + |\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2| \cos(2\omega t - \varphi) \right], \quad (6.18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta p^2 &= \hbar \omega \left[(\langle a^+ a \rangle - \langle a^+ \rangle \langle a \rangle + \frac{1}{2}) - \right. \\ &\quad \left. - |\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2| \cos(2\omega t - \varphi) \right], \quad (6.19) \end{aligned}$$

откуда

$$\begin{aligned} \Delta x^2 \cdot \Delta p^2 &= \hbar^2 \left[(\langle a^+ a \rangle - \langle a^+ \rangle \langle a \rangle + \frac{1}{2})^2 - \right. \\ &\quad \left. - (\langle a^+ \rangle - \langle a \rangle)^2 (\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2) \cos^2(2\omega t - \varphi) \right]. \quad (6.20) \end{aligned}$$

Потребуем, чтобы в любой момент времени t произведение $\Delta x^2 \cdot \Delta p^2$ принимало наименьшее возможное значение, равное $\hbar^2/4$. Из (6.20) следует, что для этого необходимо выполнение условий

$$\langle a^+ a \rangle = \langle a^+ \rangle \langle a \rangle \quad \text{и} \quad \langle a^2 \rangle = \langle a \rangle^2. \quad (6.21)$$

Для того чтобы увидеть, какие состояния $|\psi\rangle$ могут удовлетворять этим условиям, дополним состояние $|\psi\rangle$ состояниями $|\psi_i\rangle$, $i = 1, 2, \dots$, так, чтобы вся совокупность состояний образовала полную ортогональную систему. Первое из условий (6.21) при этом принимает вид

$$|\langle \psi | a | \psi \rangle|^2 + \sum_{i=1}^{\infty} |\langle \psi_i | a | \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | a | \psi \rangle|^2.$$

Отсюда получаем

$$\langle \psi_i | a | \psi \rangle = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots,$$

а это означает, что состояние $a|\psi\rangle$ ортогонально всем состояниям $|\psi_i\rangle$, $i = 1, 2, 3$, и следовательно, имеет вид $a|\psi\rangle$, где a — произвольное комплексное число. Второе условие (6.21) при этом автоматически выполняется.

Итак, мы показали, что состояния, минимизирующие соотношение неопределенностей в любой момент времени, должны являться собственными функциями оператора уничтожения a . Такие состояния называются когерентными состояниями. Обозначая их через $|\alpha\rangle$, имеем *)

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (6.22)$$

Найдем разложение состояния $|\alpha\rangle$ по состояниям $|n\rangle$

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n|\alpha\rangle |n\rangle. \quad (6.23)$$

Умножая (6.22) слева на $\langle n|$ и используя тождество $\langle n|a = \sqrt{n+1}\langle n+1|$, находим

$$\langle n+1|\alpha\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \langle n|\alpha\rangle$$

и, следовательно,

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\alpha\rangle, \quad |\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (6.24)$$

Величину $\langle 0|\alpha\rangle$ определяем из условия нормировки состояния $|\alpha\rangle$:

$$|\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2} = 1.$$

Окончательное выражение для $|\alpha\rangle$ имеет вид

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (6.25)$$

где α — произвольное комплексное число.

*) Из вышеприведенных рассуждений следует, что такие состояния представляют минимальные нерасплывающиеся волновые пакеты. Именно с этой точки зрения они и были впервые рассмотрены Э. Шредингером (1926А). Заметим, что когерентные состояния естественным образом возникают при рассмотрении осциллятора, находящегося под действием внешней силы, произвольным образом зависящей от времени (см. § 2 гл. VI).

Среднее число квантов в этом состоянии

$$\bar{n} = \langle \alpha | a^+ a | \alpha \rangle = |\alpha|^2, \quad (6.26)$$

а вероятность W_n нахождения осциллятора в состоянии $|n\rangle$ дается обычным распределением Пуассона

$$W_n(\alpha) = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!}. \quad (6.27)$$

Найдем теперь $|\alpha\rangle$ в x -представлении:

$$\begin{aligned} \langle x|\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) = \\ &= \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\hbar}} e^{-i\alpha_1\alpha_2} e^{i\sqrt{2}\alpha_2\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}x} e^{-\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}}x - \sqrt{2}\alpha_1\right)^2}. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Это выражение удобно записать так:

$$\langle x|\alpha\rangle = e^{-i\alpha_1\alpha_2} e^{\frac{i\bar{p}x}{\hbar}} \psi_0(x - \bar{x}), \quad (6.29)$$

где $\bar{p} = \sqrt{2}\sqrt{\hbar\omega}\alpha_2$, $\bar{x} = \sqrt{2}\sqrt{\frac{\hbar}{\omega}}\alpha_1$, $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$.

Отсюда видно, что распределение по координате

$$W(x) = \sqrt{\frac{\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\omega}{\hbar}(x-\bar{x})^2} \quad (6.30)$$

имеет тот же вид, что и для основного состояния осциллятора, положение равновесия которого смещено в точку \bar{x} . Распределение по импульсу имеет аналогичный вид

$$W(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar\omega}} e^{-\frac{1}{\hbar\omega}(p-\bar{p})^2}. \quad (6.31)$$

Подставим теперь в (6.25) $|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$; тогда

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^+)^n}{n!} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2} + \alpha a^+} |0\rangle. \quad (6.32)$$

Мы нашли, таким образом, простой вид оператора, переводящего $|0\rangle$ в $|\alpha\rangle$. Этот оператор не является

унитарным. Равенство (6.32) наводит, однако, на мысль рассмотреть унитарный оператор

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}. \quad (6.33)$$

Вспользуемся известным тождеством *)

$$e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}[A, B]}, \quad (6.34)$$

которое справедливо в случае $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$. Полагая $A = \alpha a^+$, $B = -\alpha^* a$, находим $[A, B] = |\alpha|^2$, и следовательно, условия применимости равенства (6.34) выполнены. Таким образом,

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^+} e^{-\alpha^* a}, \quad (6.35)$$

откуда непосредственно следует, что $|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$. Мы нашли таким образом унитарный оператор $D(\alpha)$, который переводит $|0\rangle$ в $|\alpha\rangle$.

Заметим, что операторы $D(\alpha)$ обладают следующими свойствами:

$$\left. \begin{aligned} D^+(\alpha) D(\alpha) &= D(\alpha) D^+(\alpha) = 1, \\ D^+(\alpha) &= D(-\alpha), \quad D(\beta) D(\alpha) = e^{\frac{\beta\alpha^* - \beta^*\alpha}{2}} D(\beta + \alpha), \end{aligned} \right\} \quad (6.36)$$

откуда получаем **)

$$D(\beta) D(\alpha) = e^{+(\beta\alpha^* - \beta^*\alpha)} D(\alpha) D(\beta). \quad (6.37)$$

Нетрудно также показать, что

$$\left. \begin{aligned} [a, D(\alpha)] &= \alpha D(\alpha), \quad [a^+, D(\alpha)] = \alpha^* D(\alpha), \\ D^+(\alpha) a D(\alpha) &= a + \alpha, \quad D^+(\alpha) a^+ D(\alpha) = a^+ + \alpha^*. \end{aligned} \right\} \quad (6.38)$$

Естественно поэтому операторы $D(\alpha)$ назвать операторами смещения.

*) Это тождество является весьма частным случаем известного из теории групп ряда Бейкера—Хаусдорфа (Г. Бейкер, 1905, Ф. Хаусдорф, 1906). Подробное рассмотрение этого круга вопросов можно найти в работе К. Кумара (1965).

**) Равенство (6.37) есть по существу не что иное, как запись канонических перестановочных соотношений $[a, a^+] = 1$ в форме Г. Вейля (1928). Преимущество этой формы записи заключается в том, что мы переходим от операторов a и a^+ , являющихся неограниченными, к ограниченным операторам $D(\alpha)$.

Эволюция состояния $|\alpha\rangle$ с течением времени следует непосредственно из уравнения (6.25)

$$|\alpha, t\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n e^{-t(n+\frac{1}{2})\omega t}}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle. \quad (6.39)$$

Поэтому точка на комплексной плоскости α , изображающая состояние $|\alpha, t\rangle$, равномерно вращается по окружности с угловой скоростью ω .

Рассмотрим, наконец, вопрос об ортогональности и полноте когерентных состояний. Найдем

$$\left. \begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \sum \frac{(\alpha^* \beta)^n}{n!} = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - 2\alpha^* \beta)} \\ |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 &= e^{-|\alpha - \beta|^2}. \end{aligned} \right\} \quad (6.40)$$

Таким образом, эти состояния оказываются не ортогональными друг другу. Тем не менее они образуют полную систему состояний. Чтобы увидеть это, подсчитаем интеграл

$$\int d^2\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad \text{где } \alpha = \alpha_1 + i\alpha_2 = \rho e^{i\varphi}, \quad d^2\alpha = d\alpha_1 d\alpha_2.$$

Подставляя в него выражение (6.25) для $|\alpha\rangle$, находим

$$\begin{aligned} \int d^2\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| &= \sum_{m, n} \int d\rho \cdot \rho \int d\varphi \frac{|m\rangle \langle n|}{\sqrt{m!n!}} e^{-\rho^2} \rho^{m+n} e^{-i(m-n)\varphi} = \\ &= \pi \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle \langle m| \frac{1}{m!} \int d\rho^2 \rho^{2m} e^{-\rho^2} = \pi \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle \langle m|. \end{aligned}$$

Итак, мы получили равенство

$$\frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle \langle \alpha| = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|, \quad (6.41)$$

а это и есть условие полноты системы. С помощью этого равенства можно разложить произвольное состояние по

когерентным состояниям $|\alpha\rangle$. Введем обозначение:

$$\langle \alpha | \psi \rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \langle n | \psi \rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \psi(\alpha^*). \quad (6.42)$$

Заметим, что в силу неравенства $|\langle n | \psi \rangle| \leq 1$, из (6.42) следует, что $\psi(\alpha^*)$ является целой аналитической функцией комплексной переменной α^* . В то же время имеет место неравенство $|\langle \alpha | \psi \rangle| \leq 1$, откуда получаем ограничение на рост функции $\psi(\alpha^*)$

$$|\psi(\alpha^*)| \leq e^{\frac{|\alpha|^2}{2}}. \quad (6.43)$$

Из (6.41) находим разложение произвольного состояния по когерентным состояниям

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \psi(\alpha^*) |\alpha\rangle, \quad (6.44)$$

которое полностью определяется функцией $\psi(\alpha^*)$. Однако в силу аналитичности $\psi(\alpha^*)$ нам достаточно знать значения этой функции в точках α_i ($i = 1, 2, \dots$), последовательность которых имеет предельную точку. Функция $\psi(\alpha^*)$ тем самым будет полностью определена. Это означает, что, по существу, уже система функций $|\alpha_i\rangle$ ($i = 1, 2, \dots$) является полной. Система же всех когерентных состояний заведомо является сверхполной и разложение по такой системе не является однозначным.

Интересный пример полной системы когерентных состояний был указан в книге И. фон Неймана (1932). Как видно из (6.29), α -плоскость является аналогом фазовой плоскости для классического осциллятора, причем ячейке фазовой плоскости площади $2\pi\hbar$ соответствует ячейка α плоскости площади π . Выберем в каждой такой ячейке по одному состоянию, например возьмем квадратную решетку с постоянной $\sqrt{\pi}$: $|\sqrt{\pi}(m_1 + im_2)\rangle$, $m_1, m_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Оказывается, что такая система является полной. Если же площадь ячейки взята больше π , то такая система будет уже не полна*).

*) Доказательство полноты такого рода систем дано в работе А. М. Переломова (1971).

В этой же книге утверждается (правда, никаких доказательств при этом не приводится), что если систему $|\sqrt{\pi}(m_1 + im_2)\rangle$ ортогонализировать, то мы придем к полной ортонормированной системе $|\varphi_n\rangle$, обладающей следующим замечательным свойством:

$$\Delta x_n \cdot \Delta p_n < c \frac{\hbar}{2}. \quad (6.45)$$

Состояния $|\alpha\rangle$ показывают, насколько необычными могут быть свойства собственных функций несамосопряженного оператора. Заметим, что, в то время как оператор \hat{a} имеет в качестве собственного значения любое комплексное число α , сопряженный оператор \hat{a}^+ вообще не имеет собственных функций. Собственное значение оператора \hat{a} имеет вид $\alpha = e^{i\varphi} \hat{n}^{1/2}$. Можно было бы думать поэтому, что существует представление

$$\hat{a} = e^{i\varphi} \hat{n}^{1/2}, \quad \hat{a}^+ = \hat{n}^{1/2} e^{-i\varphi}, \quad (6.46)$$

где $\hat{\varphi}$ — эрмитов оператор фазы. Однако, как заметили Л. Сусскинд и Дж. Глоговер (1964), введение оператора $\hat{\varphi}$ немедленно ведет к противоречию. Действительно, подставляя (6.46) в основное соотношение $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$, получаем

$$[\hat{n}, e^{i\varphi}] = -e^{i\varphi}, \quad (6.47)$$

откуда следует

$$[\hat{n}, \hat{\varphi}] = i, \quad (6.48)$$

т. е. \hat{n} и $\hat{\varphi}$ являются канонически сопряженными величинами. Возьмем теперь матричный элемент от (6.48)

$$(n_1 - n_2) \langle n_1 | \hat{\varphi} | n_2 \rangle = +i \delta_{n_1, n_2}. \quad (6.49)$$

При $n_1 \neq n_2$, $\langle n_1 | \hat{\varphi} | n_2 \rangle = 0$, т. е. $\hat{\varphi}$ диагонален вместе с \hat{n} . Но тогда $\hat{\varphi}$ и \hat{n} коммутируют, что противоречит (6.48). Следовательно, представления (6.46) для операторов \hat{a} и \hat{a}^+ не существует*).

*) Приведенное доказательство носит общий характер. По существу доказано следующее утверждение. Пусть оператор A имеет только дискретный спектр $A\psi_n = \lambda_n\psi_n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), причем все собственные значения λ_n не вырождены. Тогда не существует такого оператора B , что $[A, B] = +i$, т. е. величина A не имеет канонически сопряженной.

То, что формулы (6.46) неправильны, видно также из следующего. Если бы существовал оператор фазы $\hat{\phi}$, то из (6.48) вытекало бы соотношение неопределенностей

$$\Delta L \cdot \Delta \phi \geq \frac{1}{2}. \quad (6.50)$$

Однако ΔL может быть сколь угодно мало, например в стационарном состоянии $\Delta L = 0$; в то же время всегда $\Delta \phi \leq \pi$, откуда следует, что соотношение (6.50) не может всегда выполняться.

Заметим, что аналогичный факт имеет место и для «угловой переменной» φ (Д. Джадж, Дж. Льюис, 1963; Д. Джадж, 1964). Если действовать формально, то

$$[L_z, \varphi] = -i\hbar \quad (6.51)$$

($L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, z — компонента оператора момента количества движения), откуда

$$\Delta L_z \cdot \Delta \varphi \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (6.52)$$

Так же как и в предыдущем случае, это равенство не выполняется, например, для состояния с определенной проекцией момента: $L_z \psi_m = \hbar m \psi_m$. Как было показано в только что упомянутых работах, а также в работе М. Боутена, Н. Маене и П. ван Леувена (1965), неравенство (6.52) следует заменить на

$$\Delta L_z \cdot \frac{\Delta \varphi}{1 - \frac{3}{\pi^2} (\Delta \varphi)^2} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (6.53)$$

Как видно из (6.53), при $\Delta L_z \rightarrow 0$ $\Delta \varphi \rightarrow \frac{\pi}{\sqrt{3}}$, что соответствует равномерному распределению по углу φ . Заметим, что причиной невыполнения «классического» соотношения неопределенностей (6.51) является нарушение периодичности волновой функции при умножении ее на величину φ .

Возвращаясь к соотношению неопределенностей для \hat{n} и $\hat{\phi}$ заметим, что операторы $\hat{e}^{i\varphi}$ и $\hat{e}^{-i\varphi}$, в отличие от оператора $\hat{\phi}$, существуют. При этом оператор $\hat{e}^{i\varphi}$ не сохраняет норму волновой функции, оператор $\hat{e}^{-i\varphi}$, хотя и

сохраняет норму, но зато отображает все гильбертово пространство \mathcal{H} на подпространство \mathcal{H}_1 , не содержащее вектора $|0\rangle$. Такой оператор называется изометрическим. Рассмотренный пример наглядно иллюстрирует тот факт, что в случае бесконечного пространства только из сохранения нормы еще не следует унитарность оператора. Из (6.47) нетрудно получить тождество

$$\widehat{e^{i\varphi}} \widehat{e^{-i\varphi}} = 1, \quad \widehat{e^{-i\varphi}} \widehat{e^{i\varphi}} = I - |0\rangle \langle 0|. \quad (6.54)$$

Вместо (6.50) в работе В. М. Файна (1967) было получено следующее соотношение неопределенностей между числом квантов и фазой:

$$\frac{[(\Delta n)^2 + (\langle n \rangle + \frac{1}{2})^2]^{1/2} \Delta \varphi}{1 - \frac{3}{\pi^2} (\Delta \varphi)^2} \geq \frac{1}{2}. \quad (6.55)$$

Более подробное рассмотрение вопросов, связанных с операторами \hat{n} и $\hat{e}^{i\varphi}$, можно найти в обзоре П. Каррузерса и М. Нито (1968).

§ 7. Теорема вириала и ее обобщение

Кулоновский и осцилляторный потенциалы являются частными случаями степенного потенциала общего вида $U = kr^s$. Для такого рода потенциалов имеет место теорема вириала*), дающая соотношение между средней кинетической и потенциальной энергией.

Следуя В. А. Фоку (1930), покажем сначала, как эта теорема выводится из вариационного принципа.

Напомним прежде вариационный принцип: мы утверждаем, что для собственного состояния ψ_n оператора H с собственным значением E_n математическое ожидание H является стационарным. Это значит, что если

$$H\psi_n = E_n\psi_n,$$

*) В классической механике эта теорема была известна еще Клаузиусу. В квантовой механике она была впервые установлена в работе М. Борна, В. Гейзенберга, П. Йордана (1925). Различные формы теоремы вириала, а также ее обобщение на случай непрерывного спектра можно найти в книге Ю. Н. Демкова (1958).

то величина $\bar{H} = \int \psi^* H \psi dr$ или, лучше *),

$$\bar{H} = \frac{\int \psi^* H \psi dr}{\int \psi^* \psi dr} \quad (7.1)$$

для $\psi = \psi_n + \delta\psi$ отличается от E_n на величину порядка $(\delta\psi)^2$; члены порядка $\delta\psi$ исчезают. В частности, относительно ψ_0 , соответствующий низшему (основному) состоянию, можно утверждать, что подстановка $\psi = \psi_0$ дает абсолютный минимум $\bar{H} = E_0$.

Тот факт, что имеет место вариационный принцип, проще всего проверить, представив вариацию в виде разложения по собственным функциям оператора H

$$\delta\psi = \sum_m \delta C_m \psi_m$$

и используя ортогональность собственных функций: очевидно, что вариация \bar{H} пропорциональна $(\delta C_m)^2$.

Теперь запишем $\bar{H} = \bar{U} + \bar{T}$, где \bar{U} — математическое ожидание потенциальной энергии, \bar{T} — математическое ожидание кинетической энергии.

Возьмем специальный вид вариации ψ : преобразование подобия всех координат, близкое к единице:

$$\psi' = \psi + \delta\psi = \left(1 + \frac{3}{2}\varepsilon\right) \psi[(1 + \varepsilon)r], \quad (7.2)$$

где ε — малая величина. Множитель перед ψ обеспечивает сохранение нормировки, $\int |\psi'|^2 dr' = \int |\psi|^2 dr$.

Так как $\bar{U} = kr^s$, то, очевидно, $\frac{\delta\bar{U}}{\bar{U}} = -\varepsilon s$.

Кинетическая энергия пропорциональна $\int |\nabla\psi|^2 dr$, и, следовательно, при сокращении всех масштабов кинетическая энергия растет обратно пропорционально квадрату масштаба $\frac{\delta\bar{T}}{\bar{T}} = 2\varepsilon$.

*) В формуле (7.1) нет надобности заботиться о сохранении нормировки волновой функции при ее вариации.

Потребуем экстремальности $\delta\bar{H} = \delta\bar{U} + \delta\bar{T} = (-s\bar{U} + 2\bar{T})\varepsilon$. Отсюда следует

$$\bar{T} = \frac{s}{2}\bar{U}, \quad \bar{H} = \frac{s+2}{2}\bar{U} = \frac{s+2}{s}\bar{T}, \quad (7.3)$$

а это и есть теорема вириала. В случае гармонического осциллятора $\bar{T} = \bar{U}$, а для кулоновского взаимодействия полная энергия H в стационарном состоянии равна средней кинетической энергии, взятой с обратным знаком.

Вариационный принцип позволяет дать наглядный ответ на вопрос, «почему электрон не падает на ядро»: приближение электрона к ядру уменьшает его потенциальную энергию (увеличивает по абсолютной величине отрицательную по знаку потенциальную энергию), пропорциональную $1/r$, но одновременно, по принципу неопределенности, растет как $1/r$ импульс электрона, а следовательно, кинетическая энергия его растет как $1/r^2$. Поэтому полная энергия имеет минимум при вполне определенном среднем расстоянии электрона от ядра: дальнейшему приближению («падению») электрона препятствует рост кинетической энергии.

Из сказанного видно также, что при потенциале, возрастающем быстрее $1/r^2$ при $r \rightarrow 0$, у. Ш. не может иметь определенного нижнего уровня, и в таком потенциале частица падает на центр притяжения.

Другой способ получения теоремы вириала заключается в вычислении среднего значения величины $\frac{d}{dt}\langle rp \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, rp] \rangle$. Нетрудно видеть, что в стационарном состоянии $\frac{d}{dt}\langle rp \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, rp] \rangle = 0$; более того, аналогичное соотношение имеет место для произвольного оператора A :

$$\langle \dot{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle = 0. \quad (7.4)$$

Это и есть обобщение теоремы вириала (Дж. Хиршфельдер, 1960). Нетривиальным моментом здесь является выбор подходящего оператора A . В случае удачного выбора этого оператора можно получить некоторые интересные соотношения для средних значений.

Проиллюстрируем обобщенную теорему вириала на примере кулоновского и осцилляторного потенциалов (Дж. Эпштейн, С. Эпштейн, 1962). Перепишем сначала кулоновский гамильтониан в виде

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r}, \quad (7.5)$$

где $p_r = -i \frac{\hbar}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$, $[p_r, r] = -i\hbar$, $\dot{r} = \frac{p_r}{m}$, $\dot{p}_r = \frac{\hbar^2 \hat{L}^2}{mr^3} - \frac{\alpha}{r^2}$.

В качестве оператора A выберем $p_r r^{s+1}$. Равенство (7.4) принимает теперь вид

$$\frac{d}{dt} \langle p_r r^{s+1} \rangle = \langle \dot{p}_r r^{s+1} \rangle + \langle p_r \dot{r} r^s \rangle + \dots + \langle p_r r^s \dot{r} \rangle = 0. \quad (7.6)$$

Перенося в (7.6) оператор $\dot{r} = p_r/m$ налево с помощью тождества

$$r^k p_r = p_r r^k + i\hbar k r^{k-1}, \quad (7.7)$$

получаем

$$\langle \dot{p}_r r^{s+1} \rangle + \frac{s+1}{m} \langle p_r^2 r^s \rangle + \frac{is(s+1)}{2} \frac{\hbar}{m} \langle p_r r^{s-1} \rangle = 0. \quad (7.6')$$

Для упрощения последнего члена этой формулы рассмотрим равенство $\frac{d}{dt} \langle r^s \rangle = 0$ или

$$\left. \begin{aligned} \frac{s}{m} \langle p_r r^{s-1} \rangle + i \frac{s(s-1)}{2} \frac{\hbar}{m} \langle r^{s-2} \rangle &= 0, \\ \langle p_r r^{s-1} \rangle &= -i(s-1) \frac{\hbar}{2} \langle r^{s-2} \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (7.8)$$

Выражая \dot{p}_r и p_r^2 через r с помощью (7.5) и используя (7.8), получаем

$$2E(s+1) \langle r^s \rangle + \alpha(2s+1) \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s\hbar^2}{m} \left(\frac{s^2-1}{4} - l(l+1) \right) \langle r^{s-2} \rangle = 0. \quad (7.9)$$

Мы получили, таким образом, рекуррентное соотношение для средних значений степеней r . Это соотношение было ранее получено Х. Крамерсом (1951) иным спосо-

бом. Заметим, что при $s=0$ мы получаем из (7.9) обычную теорему вириала и что член $\frac{\hbar^2 s(s^2-1)}{4m} \langle r^{s-2} \rangle$ учитывает некоммутативность операторов r и p_r . Поэтому при отбрасывании его получаются рекуррентные соотношения для классического случая.

Перейдем теперь к рассмотрению случая трехмерного гармонического осциллятора. Имеем

$$H = \frac{1}{2m} p_r^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\hat{L}^2}{r^2} + \frac{m}{2} \omega^2 r^2. \quad (7.10)$$

Нетрудно видеть, что соотношения (7.6) — (7.8) в этом случае по-прежнему выполняются. Подставляя в (7.6') величины \dot{p}_r и p_r^2 , выраженные через r с помощью (7.10), находим

$$2E(s+1) \langle r^s \rangle - m\omega^2(s+2) \langle r^{s+2} \rangle + \frac{\hbar^2}{m} s \left[\frac{s^2-1}{4} - l(l+1) \right] \langle r^{s-2} \rangle = 0. \quad (7.11)$$

Как и в предыдущем случае, при $s=0$ мы получаем теорему вириала. Заметим, что, в отличие от (7.9), соотношения (7.11) связывают между собой только четные или только нечетные степени r . Это не удивительно, поскольку гамильтониан (7.10) является четным относительно r , т. е. при замене $r \rightarrow -r$ не изменяется

§ 8. Одинаковые частицы и статистическая физика

Задача о движении двух взаимодействующих частиц как в классической механике, так и в квантовой механике сводится к задаче об одной частице.

Поэтому у. Ш., выписанное выше, с ψ , зависящей от трех координат, относится не только к движению электрона в поле тяжелого неподвижного ядра, но и к двухатомной молекуле. При этом в дальнейшем мы пользуемся обычным приближением Борна — Оппенгеймера: при заданном положении ядер полагаем, что электроны находятся в низшем энергетическом состоянии. Энергия всей системы, включая энергию электронов, зависящая от расстояний между ядрами, представляет собой тот

эффективный потенциал, который действует на движение ядер.

Решение у. Ш. для двухатомной молекулы имеет вид $R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$, где r, θ, φ характеризуют вектор r_{12} , соединяющий 1-е и 2-е ядра.

Новый момент возникает в том случае, если оба ядра тождественны, как, например, в молекулах H_2, C_2, N_2, O_2 .

Если ядра состоят из четного числа нуклонов, то волновая функция должна быть симметрична: говорят, что такие ядра являются бозонами и подчиняются статистике Бозе.

Особенно просто обстоит дело, если спин ядра равен нулю. Условие симметрии функции относительно перестановки 1-го и 2-го ядер, т. е. относительно изменения знака $r_{12} \rightarrow -r_{12}$ (при этом $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi$), приводит к исключению нечетных значений l .

Опыт показывает, что молекула C_2 , состоящая из двух ядер C^{12} , находится лишь в состояниях $l = 0, l = 2, l = 4$ и т. д. Молекулы из разных ядер C^{12}, C^{13} или C^{12}, C^{14} находятся во всех состояниях $l = 0, l = 1, l = 2, l = 3$ и т. д.

Иногда различие между классической (больцмановской) статистикой и квантовой статистикой Бозе — Эйнштейна формулируют как различие в способе подсчета числа состояний.

Пусть есть две частицы A, B и два состояния 1, 2. В классической статистике мы различаем два состояния: A_1B_2 и B_1A_2 ; в квантовой статистике, если A и B тождественны, мы считаем, что есть только одно состояние системы: одна частица в первом состоянии и одна частица во втором состоянии.

Пример молекулы $C^{12}C^{12}$ весьма поучителен: здесь ясно видно, что дело не в способе подсчета; в бозе-системе оказались запрещенными и не осуществляются в природе такие состояния (с нечетными l), которые существуют в системе из разных частиц. Для тождественных частиц мы имеем другую механику, запрещающую определенные состояния; другая статистика — это просто следствие другой механики.

В случае фермионов ситуация проще, здесь даже начинающие не делают ошибки, невозможность находде-

ния двух частиц в одном состоянии есть очевидный запрет.

Ситуация, которая ясна для двухатомной молекулы, не так прозрачна для независимых частиц в общем поле и в особенности для сплошного спектра. В примере, приведенном выше, при разных A и B есть два разных состояния A_1B_2 и B_1A_2 . Если свойства A и B близки, энергия этих состояний также близка. Если к тому же между A и B есть взаимодействие, то вместо указанных двух состояний решениями у. Ш. будут

$$A_1B_2 + B_1A_2 \text{ и } A_1B_2 - B_1A_2.$$

Включение взаимодействия перепутывает состояния, но по общим теоремам не меняет общего числа состояний ($2 = 2$), так же как поворот осей координат не меняет размерности пространства.

Если две частицы A и B суть два совпадающих бозона $B = A$, то существует только симметричное состояние $A_1B_2 + B_1A_2$, второе состояние не существует в том же самом смысле, как не существует $C^{12}C^{12}$ с $l = 1$. Для фермионов запрещено симметричное (четное) состояние $A_1B_2 + B_1A_2$ и осуществляется $A_1B_2 - B_1A_2$.

В классической статистике состояния подсчитываются так, как будто все частицы разные.

Пусть число частиц во много раз меньше числа уровней, на которых в среднем размещаются частицы. Тогда вероятность попадания двух частиц на один и тот же уровень (что строго запрещено для фермионов) мала. В этом случае общее число состояний для разных частиц отличается от числа состояний бозонов (или равного ему числа состояний фермионов) постоянным множителем $M!$, где N — число частиц. Постоянный множитель в числе состояний даст постоянное слагаемое в энтропии и в свободной энергии; поэтому классическая статистика в этом случае даст правильные представления. Наблюдаемые величины, не зависящие от аддитивной постоянной в бозе- и ферми-статистиках, в пределе при малых заполнениях совпадут со значениями величин, даваемых классической статистикой.

Как справляется классическая статистика с тем, что в двухатомной молекуле половины уровней нет? Для

этого вводят число симметрии молекулы 2 (для двухатомной молекулы) и делят на 2 фазовый объем или уменьшают энтропию на $k \ln 2$.

Интересно проследить, как то же число 2 появляется в двухатомной молекуле из ядер со спином $1/2$, например H_2 . Волновая функция в этом случае представляет собой произведение орбитальной и спиновой функций.

Антисимметричная спиновая функция $\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1$ двух частиц со спином $1/2$ соответствует полному спину 0.

Симметричная функция соответствует $s = 1$: таких функций — три: $s_z = 1, \alpha_1\alpha_2$; $s_z = 0, \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1$; $s_z = -1, \beta_1\beta_2$. При $s = 0$ орбитальная функция четная, $l = 0, l = 2, \dots$ (параводород). При $s = 1$ орбитальная функция нечетная, $l = 1, l = 3, \dots$ (ортоводород). Таким образом, у одних вращательных состояний спиновое состояние имеет одно: $g = 1$, у других — три спиновых состояния: $g = 3$; среднее значение: $\bar{g} = 2$.

Молекула, состоящая из двух разных атомов, например HT (водород — тритий), имеет по четыре состояния*) при каждом l ; при любом l есть и $s = 0, g = 1$ и $s = 1, g = 3$.

Уменьшение от $g = 4$ для молекулы из разных атомов до $\bar{g} = 2$ для молекулы из одинаковых атомов как раз и соответствует числу симметрии 2.

После введения числа симметрии классическая статистика успешно и правильно справляется с задачами теории диссоциации молекул, да и вообще со всеми задачами, в которых малы все числа заполнения; в этой ситуации результаты не зависят ни от спина, ни от статистики ядер; результаты не зависят также, как легко показать, и от того, имеем ли мы дело с одним типом ядер или со смесью изотопов.

Получение правильных результатов не исключает необходимости ясного понимания самих основ классической, бозе- и ферми-статистик, для чего и служили примеры, приведенные выше.

*) Заметим, что эти четыре состояния можно было подсчитать проще, как произведение двух состояний H ($s_z = +1/2; s_z = -1/2$) и двух таких же состояний T . Классификация их по полному спину не меняет числа состояний.

ГЛАВА II

НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР

§ 1. Введение. Волновые функции непрерывного спектра с $l = 0$

В этой главе рассматриваются состояния непрерывного спектра. Такие состояния, как известно, описывают рассеяние частицы в потенциальном поле. Теория рассеяния, являющаяся важным разделом квантовой механики, разработана во всех деталях. Наиболее полное изложение этой теории можно найти в книге Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963) и в монографиях М. Гольдбергера и К. Ватсона (1964) и Р. Ньютона (1966), специально посвященных теории рассеяния. В последней можно найти подробную библиографию по данному вопросу. В данной главе мы ограничимся рассмотрением лишь некоторых свойств волновых функций непрерывного спектра.

Обратимся сначала к функциям непрерывного спектра с заданными значениями E и l . Эти функции, как следует из (1.8) гл. I, существенно отличны от нуля во всем пространстве. Условие убывания на бесконечности поэтому отсутствует, и остается лишь одно условие (1.7) гл. I, налагаемое на две линейно независимые функции $\chi^{(\pm)}$. Следовательно, при фиксированном значении энергии E и любом l мы можем образовать решение, удовлетворяющее условию (1.7) гл. I, причем это решение можно выбрать, например, вещественным. Некоторые свойства таких решений при $l = 0$ рассматриваются в данном параграфе, а случай $l \neq 0$ — в § 2.

Мы видим, что в случае непрерывного спектра, в отличие от случая дискретного спектра, при заданном

$E > 0$ есть решения у. Ш. для всех значений l . Поэтому любая суперпозиция этих решений опять является решением у. Ш. и наоборот: любое решение у. Ш. с определенной положительной энергией можно представить в виде суперпозиции решений с различными значениями l и фиксированным E . С этим же обстоятельством связана возможность выбора различных полных систем волновых функций.

Важным и часто используемым в теории рассеяния видом состояний являются состояния типа плоская проходящая волна + рассеянная волна, т. е. состояния, асимптотика которых при $r \rightarrow \infty$ имеет вид $e^{ikz} + f(\theta, \varphi)e^{+ikr}/r$. Можно построить также состояния с асимптотикой $e^{ikz} + f_1(\theta, \varphi)e^{-ikr}/r$; при этом функция f_1e^{-ikr}/r описывает сходящуюся волну, а e^{ikz} описывает частицу, вылетающую по направлению оси z . С такими функциями, однако, приходится работать значительно реже. Все перечисленные выше вопросы разбираются в § 3.

Наконец, в последнем параграфе этой главы, дается вывод так называемой оптической теоремы и рассматривается ее обобщение.

Перейдем теперь к более подробному рассмотрению состояний с фиксированными значениями E и l . Посмотрим, чему соответствуют состояния $\chi^{(\pm)}$. Напомним, что в состоянии, описываемом функцией $\psi(\mathbf{r})$, поток частиц в точке \mathbf{r} равен

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*). \quad (1.1)$$

Подставляя сюда функции $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{\chi^{(\pm)}}{r}$, получим

$$\mathbf{j}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \pm\frac{v}{4\pi}\frac{\mathbf{r}}{r^3}, \quad (1.2)$$

где $v = \hbar k/m$ — скорость, соответствующая волновому вектору \mathbf{k} . Таким образом, функция $\chi_k^{(+)}$ описывает частицы, движущиеся со скоростью v во все стороны от начала координат (расходящаяся волна), а функция $\chi_k^{(-)}$ — частицы, движущиеся со скоростью v по направлению к началу координат (сходящаяся волна). Пол-

ный поток, проходящий за 1 секунду через сферу радиуса R внутрь (в случае $\chi^{(-)}$) или наружу (в случае $\chi^{(+)}$), равен, очевидно

$$4\pi R^2 j^{(\pm)}(R) = \pm v. \quad (1.3)$$

Таким образом, принятая в (1.8) гл. I нормировка функции $\chi_k^{(\pm)}$ соответствует тому, что через сферу большого радиуса в 1 секунду проходит v частиц, а плотность частиц ρ равна $1/4\pi R^2$ частиц/см³. Отсюда непосредственно вытекает, что функции $\chi^{(\pm)}$ не могут являться решениями у. Ш. при $r = 0$, поскольку эта точка является источником или стоком частиц. Из двух функций $\chi_k^{(\pm)}$ мы можем, однако, образовать такую линейную комбинацию $\chi_k(r)$, которая обладает правильным поведением при $r = 0$. Согласно (1.9) гл. I в χ_k входит $\chi_k^{(-)}$ и $\chi_k^{(+)}$. Первая из них соответствует потоку частиц, падающих на силовой центр из бесконечности, а вторая — потоку частиц, расходящемуся от него. Иными словами, $\chi_k(r)$ описывает рассеяние частиц в потенциальном поле $V(r)$. Рассмотрим подробнее случай $l = 0$. Пусть потенциал тождественно равен нулю. В этом случае решения

$$\chi_k^{(\pm)}(r) = e^{\pm ikr} \quad (1.4)$$

являются точными решениями уравнения (1.6') гл. I во всем пространстве, кроме точки $r = 0$. Граничным условиям при $r = 0$ удовлетворяет единственное решение

$$\chi_k(r) = \chi_k^{(-)} - \chi_k^{(+)} = -2i \sin kr \xrightarrow{r \rightarrow 0} -2ikr. \quad (1.5)$$

Ясно, что при отсутствии потенциала нет и рассеяния. Поэтому χ_k описывает свободное, невозмущенное движение частиц в пространстве (с нулевым орбитальным моментом относительно точки $r = 0$). Величина $A(k)$ в

$$\chi_k(r) = A(k)(\chi_k^{(-)} - S(k)\chi_k^{(+)})$$

— амплитуда при сходящейся волне — является, очевидно, произвольным параметром, не зависящим от потенциала $U(r)$; $A(k)$ зависит лишь от того, сколько частиц будет «направлено» в точку $r = 0$ из бесконечности. Величина $S(k)$, напротив, определяется исключительно

видом потенциала, и именно она определяет рассеивательную способность этого потенциала.

Чтобы явным образом выделить из волновой функции часть, описывающую рассеяние в потенциальном поле, перепишем $\chi_k(r)$ следующим образом:

$$\chi_k(r) = A(k) [\chi_k^{(-)} - \chi_k^{(+)} - (S(k) - 1) \chi_k^{(+)}]. \quad (1.6)$$

Первые два члена в квадратной скобке совпадают при $r > R$ с волновой функцией, описывающей свободное движение (см. (1.5)). Последний член, стало быть, описывает рассеянную волну.

При рассеянии в потенциальном поле не может происходить поглощения или рождения частиц. Поэтому число падающих на силовой центр частиц должно равняться числу частиц, уходящих от него на бесконечность. Это означает, что $|S(k)| = 1$, и поэтому можно всегда записать $S(k)$ в виде

$$S(k) = e^{2i\delta(k)}, \quad (1.7)$$

где δ — действительная величина, называемая фазой рассеяния. В случае свободного движения имеем, очевидно, $\delta(k) = 0$ (см. (1.6)). В общем случае $\delta \neq 0$, и волновую функцию при $r \geq R$ можно всегда записать в любой из следующих форм:

$$\begin{aligned} \chi_k(r) &= Ae^{i\delta} (\chi_k^{(-)} e^{-i\delta} - \chi_k^{(+)} e^{i\delta}) = -2iAe^{i\delta} \sin(kr + \delta) = \\ &= -2iA [\sin kr + e^{i\delta} \sin \delta e^{ikr}]. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Часто возникает вопрос, по какому праву мы можем разбивать волновую функцию на две части и приписывать им смысл волновых функций, описывающих сходящийся и расходящийся потоки частиц. Можно поставить вопрос по-другому. Волновую функцию непрерывного спектра всегда можно выбрать действительной. Известно, однако, что в состоянии, описываемом действительной волновой функцией, поток частиц равен нулю. Имеем ли мы право отождествлять пропорциональную e^{ikr} часть функции в последнем члене (1.8) с рассеянными частицами?

Для ответа на этот вопрос необходимо рассмотреть движение волновых пакетов. Обратимся, например, к за-

даче о прохождении частиц через барьер. Потенциал имеет вид (рис. 5)

$$\left. \begin{aligned} U &= U_0 \quad \text{при} \quad -a < x < a, \\ U &= 0 \quad \text{при} \quad x < -a, \quad a < x. \end{aligned} \right\} \quad (1.9)$$

Волновая функция, как известно, может быть записана как

$$\Psi_E(x, t) = \begin{cases} (e^{ikx} - A(k) e^{-ikx}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} & \text{при} \quad x < -a, \\ B(k) e^{ikx - i\frac{Et}{\hbar}} & \text{при} \quad x > a, \end{cases} \quad (1.10)$$

где A обычно называют коэффициентом отражения.

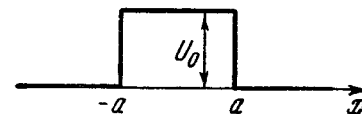


Рис. 5.

Построим волновой пакет из состояний с энергией $E \approx E_0$:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\Delta E} \int_{E_0 - \Delta E}^{E_0 + \Delta E} dE \Psi_E(x, t), \quad (1.11)$$

причем ΔE будем считать настолько малой, что можно пренебречь энергетической зависимостью величин A и B и, кроме того, для k использовать приближенную формулу

$$k = k_0 + (E - E_0) \left(\frac{dk}{dE} \right)_0 + \dots = k_0 + \frac{E - E_0}{\hbar v_0}. \quad (1.12)$$

Элементарное вычисление сразу дает нам

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \varphi^{(+)}(x, t) - A(k_0) \varphi^{(-)}(x, t) & \text{при} \quad x < -a, \\ B(k_0) \varphi^{(+)}(x, t), & \text{при} \quad x > a, \end{cases} \quad (1.13)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi^{(\pm)}(x, t) &\equiv \frac{1}{2\Delta E} \int_{E_0 - \Delta E}^{E_0 + \Delta E} dE e^{i(\pm kx - \frac{Et}{\hbar})} = \\ &= e^{i(\pm k_0 x - \frac{E_0 t}{\hbar})} \frac{\sin(x \mp v_0 t)}{(x \mp v_0 t)}. \end{aligned}$$

Функция $\varphi^{(+)}(x, t)$ отлична от нуля, только если $x - v_0 t \approx 0$, а функция $\varphi^{(-)}$, — только если $x + v_0 t \approx 0$. Рассмотрим область слева от барьера, где $x < 0$. Из рис. 6 видим, что когда $t < 0$, только $\varphi^{(+)}$ отлична от нуля (волна

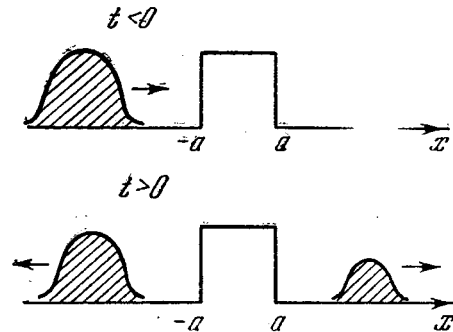


Рис. 6.

из $-\infty$ падает на барьер). При $t > 0$ положение меняется: теперь слева нет члена $\varphi^{(+)}$, зато отличен от нуля член $\varphi^{(-)}$ (волна отразилась от барьера). Справа от барьера $x > 0$, поэтому условие $x - v_0 t$ может выполняться только при $t > 0$. Таким образом, при $t < 0$ справа от барьера волновая функция везде равна нулю. При $t > 0$ появляется волна $B(k_0)\varphi^{(+)}$, распространяющаяся по направлению $x \rightarrow +\infty$.

Коэффициенты $A(k_0)$ и $B(k_0)$, очевидно, определяют интенсивность отраженной и прошедшей волн, и мы видим, что действительно e^{ikh} и e^{-ikh} можно с полным основанием трактовать как волновые функции частиц, распространяющихся по направлениям $x = +\infty$ и $x = -\infty$ соответственно.

Разберем еще вопрос о нормировке волновых функций непрерывного спектра. Функции непрерывного спектра $\chi_k(r)$ отличны от нуля во всем пространстве, и их нельзя нормировать на единицу, как в случае дискретного спектра. Нормировка на единицу соответствует условию, чтобы во всем пространстве находилась только одна частица. Так как функция непрерывного спектра отлична от нуля во всем пространстве, то ясно, что при нормировке волновой функции на одну частицу во всем

пространстве (т. е. $\int_0^\infty |\chi_k(r)|^2 dr = 1$) нормировочный коэффициент $A(k)$ необходимо положить равным нулю. Можно, правда, как делалось часто раньше, использовать предельную процедуру: считать сначала, что пространство не безгранично, а заключено в большую сферу радиуса R . При этом интервал значений $0 < r < R$ ограничен и нормировочная постоянная $A(k)$ получается конечной. В окончательном результате R устремляют к бесконечности, а A — к нулю так, что сохраняется постоянным произведение $|A|^2 R$. Эта процедура, однако, излишне громоздка, и ее сейчас почти не используют.

Обычно используется нормировка на δ -функцию:

$$\int_0^\infty \chi_k(r) \chi_{k'}^*(r) dr = \delta(k - k'). \quad (1.14)$$

Докажем возможность такой нормировки. Рассмотрим два близких значения k и k_1 :

$$\chi_k'' + (k^2 - V)\chi_k = 0, \quad \chi_{k_1}'' + (k_1^2 - V)\chi_{k_1} = 0.$$

Умножим первое уравнение на $\chi_{k_1}^*$, второе — на χ_k и вычтем одно из другого:

$$\chi_{k_1}^* \chi_k'' - \chi_k \chi_{k_1}'' = (k_1^2 - k^2) \chi_k \chi_{k_1}^*.$$

Проинтегрировав это равенство по r , получим

$$\int_0^R \chi_k \chi_{k_1}^* dr = \frac{1}{k_1^2 - k^2} (\chi_k'(r) \chi_{k_1}^*(r) - \chi_k(r) \chi_{k_1}'^*(r)) \Big|_0^R. \quad (1.15)$$

На нижнем пределе все функции исчезают; пользуясь асимптотикой волновых функций $\chi_k \sim A(k) \sin(kr + \delta)$, после незначительных преобразований получаем

$$\int_0^R \chi_k \chi_{k_1}^* dr = A(k) A^*(k_1) \left\{ \frac{(k + k_1) \sin[(k_1 - k)R + \delta(k_1) - \delta(k)]}{2(k_1^2 - k^2)} - \frac{1}{2(k + k_1)} \sin[(k + k_1)R + \delta(k) + \delta(k_1)] \right\}.$$

Так как $R \rightarrow \infty$, то последний член эффективно равен нулю. Действительно, как функция k и k_1 он сильно осциллирует, причем частота осцилляций стремится к бесконечности вместе с R . Всякий интеграл, в подынтегральное выражение которого входит такая функция, умноженная на гладкие функции, стремится к нулю. В этом смысле и было сказано, что эти функции равны нулю эффективно.

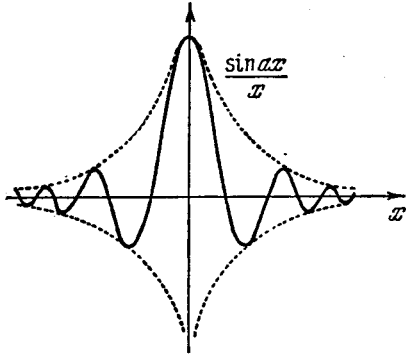


Рис. 7.

Если $(k_1 - k)$ — фиксированная конечная величина, то эффективно равен нулю и первый член. Рассмотрим теперь случай, когда $(k_1 - k) \rightarrow 0$. Прежде всего заметим, что разностью $\delta(k_1) - \delta(k)$ можно пренебречь по сравнению с $R(k_1 - k)$, так что

$$\int_0^R \chi_k(r) \chi_{k_1}^*(r) dr = A(k) A^*(k_1) \frac{1}{2} \frac{\sin(k_1 - k)R}{(k_1 - k)}. \quad (1.16)$$

Известно, однако, что

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin ax}{x} = \pi \delta(x). \quad (1.17)$$

График функции $\frac{\sin ax}{x}$ изображен на рис. 7. Она велика в области $x \sim \frac{1}{a}$ и быстро уменьшается с ростом x . В пределе $a \rightarrow \infty$ эта функция равна нулю при $x \neq 0$ и равна бесконечности при $x = 0$. Площадь под кривой равна

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin ax}{x} dx = \pi.$$

Если $(k_1 - k) \rightarrow 0$, то эффективно равен нулю и первый член. Рассмотрим теперь случай, когда $(k_1 - k) \rightarrow 0$. Прежде всего заметим, что разностью $\delta(k_1) - \delta(k)$ можно пренебречь по сравнению с $R(k_1 - k)$, так что

Если $(k_1 - k)$ — фиксированная конечная величина, то эффективно равен нулю и первый член. Рассмотрим теперь случай, когда $(k_1 - k) \rightarrow 0$. Прежде всего заметим,

Таким образом, равенство (1.17) доказано. С учетом этого равенство (1.16) принимает вид

$$\int_0^{\infty} \chi_k(r) \chi_{k'}^*(r) dr = |A(k)|^2 \frac{\pi}{2} \delta(k - k'). \quad (1.18)$$

Итак, возможность нормировки на δ -функцию доказана, и соответствующий коэффициент равен

$$A(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}. \quad (1.19)$$

Иногда удобно нормировать функции непрерывного спектра на $\delta(\varphi(k) - \varphi(k'))$, где $\varphi(k)$ — какая-то функция k . Соответствующая нормировочная постоянная равна

$$A(\varphi(k)) = \sqrt{\frac{dk}{d\varphi(k)}} A(k). \quad (1.20)$$

Например, при нормировке на δ -функцию от энергии $\varphi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ и нормировочная постоянная $A(E)$ равна

$$A(E) = \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar v}}. \quad (1.21)$$

Функции дискретного спектра обращаются в нуль при $r \rightarrow \infty$. Из формулы (1.15) поэтому сразу следует ортогональность функций непрерывного спектра ко всем функциям дискретного спектра*). Кроме того, очевидно, ортогональны любые две функции дискретного спектра с разными энергиями $E_m \neq E_n$. Поэтому мы всегда можем так нормировать волновые функции, чтобы они составляли ортонормированную систему:

$$\left. \begin{aligned} \int \chi_m(r) \chi_n^*(r) dr &= \delta_{mn}, & \int \chi_k(r) \chi_{k'}^*(r) dr &= \delta(k - k'), \\ \int \chi_k(r) \chi_n^*(r) dr &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.22)$$

Здесь δ_{mn} — символ Кронекера.

*) Заметим в связи с этим, что если заменить функции непрерывного спектра функциями свободного движения, что иногда и делается, то последние уже не будут ортогональны функциям дискретного спектра, что может привести к значительной ошибке при вычислениях.

Система волновых функций непрерывного и дискретного спектров является полной. Это значит, что произвольную достаточно хорошую функцию $f(r)$ можно разложить по этой системе, т. е. имеет место тождество

$$f(r) = \int dk C(k) \chi_k(r) + \sum_n C_n \chi_n(r). \quad (1.23)$$

Коэффициенты $C(k)$ и C_n нетрудно найти, умножая обе части (1.23) на $\chi_k^*(r)$ и $\chi_n^*(r)$ и интегрируя по r :

$$C(k) = \int \chi_k^*(r') f(r') dr', \quad C_n = \int \chi_n^*(r') f(r') dr'. \quad (1.24)$$

Подставляя (1.24) в (1.23), получаем

$$f(r) = \int \left[\sum_n \chi_n(r) \chi_n^*(r') + \int dk \chi_k(r) \chi_k^*(r') \right] f(r') dr'. \quad (1.25)$$

Отсюда следует, что выражение, стоящее в скобках, можно отождествить с δ -функцией:

$$\sum_n \chi_n(r) \chi_n^*(r') + \int_0^\infty dk \chi_k(r) \chi_k^*(r') = \delta(r - r'). \quad (1.26)$$

Если функции непрерывного спектра нормированы на δ -функцию от энергии, то формулы (1.23)–(1.26) сохраняют свой вид, но вместо χ_k в них надо подставить χ_E и интегрировать не по k , а по E .

§ 2. Движение с орбитальным моментом $l \neq 0$; движение в кулоновском поле

Волновая функция частицы, находящейся в состоянии с заданными значениями орбитального момента l и его проекции m , имеет вид $\frac{\chi_{kl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$, где

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{lm}(\theta) e^{im\varphi},$$

а χ_{kl} должна находиться из уравнения (1.5) гл. I.

Свойства сферических функций, описывающих угловую зависимость волновой функции с данными l и m , хорошо изучены.

Мы остановимся здесь лишь на нескольких теоремах, которые легко и наглядно вытекают из общефизических представлений и тех аналогий, которые получаются в пределе, при классическом движении*).

Начнем с функции, отвечающей максимальному значению $|m|$: $m = \pm l$. Очевидно, что в этом случае $\Theta_{ll}(\theta)$ не имеет узлов (поскольку $\sin m\varphi$ и $\cos m\varphi$ имеют максимальное число узлов). В пределе при большом l этот случай соответствует орбите, лежащей в плоскости экватора так, чтобы вектор момента количества движения был параллелен оси z . Значит, в этом предельном случае $|\Theta_{ll}(\theta)|^2 = \delta(\theta - \pi/2)$.

Эту оценку можно уточнить и найти закон, по которому при увеличении l величина $|\Theta_{ll}(\theta)|^2$ приближается к $\delta(\theta - \pi/2)$, т. е. сужается, концентрируясь к экватору.

Для этого заметим, что квадрат момента равен $l(l+1)$, а проекция момента m на ось z равна l . Отсюда находим средний угол α между осью z и нормалью к плоскости орбиты, $\cos \alpha = \frac{l}{\sqrt{l(l+1)}} \approx 1 - \frac{1}{2l}$, $\alpha \approx \sqrt{\frac{1}{l}}$.

Рассматривая плоскость, наклоненную таким образом, легко определить, что средний угол β между вектором, лежащим в такой наклонной плоскости, и плоскостью экватора равен $\sqrt{\beta^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha = \sqrt{\frac{1}{2l}}$.

Следовательно, при большом, но конечном l , $|\Theta_{ll}(\theta)|^2$ имеет максимум при $\theta = \pi/2$ и эффективную ширину $\sqrt{1/2l}$. Это значит, что приближенно ее можно заменить на $\frac{\sqrt{l}}{\sqrt{\pi}} e^{-l(\theta - \pi/2)^2}$; коэффициент перед экспонентой определяется из условия нормировки сферических гармоник.

Как представить себе наглядно противоположный предельный случай — функцию с данным большим l и

*) Сравните с работой П. Бруссара и Х. Толхека (1957), а также с квазиклассическим рассмотрением многомерного случая в § 3 гл. V. Заметим, что аналогичный способ рассмотрения коэффициентов Клебша—Гордана и Рака использовался в книге Е. Вигнера (1959).

с $m = 0$? С такими функциями приходится иметь дело, в частности, в задачах рассеяния, поскольку частица, движущаяся по оси z , тождественно имеет $m = 0$.

Свойства искомой функции выясним, рассматривая частицы, движущиеся по круговым орбитам. Представим себе совокупность всех круговых орбит с осями, перпендикулярными к оси z , т. е. лежащими в плоскости x, y (ясно, что у таких орбит $m = 0$).

Направление осей в плоскости x, y равновероятно.

Все орбиты пересекаются на полюсах и плотность вероятности на единицу поверхности телесного угла (т. е. на единицу поверхности сферы) максимальна, обращаясь в бесконечность на полюсах при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$.

Найдем выражение плотности вероятности: при движении по меридиану все интервалы $d\theta$ равновероятны, $dW = d\theta/\pi$. Отнесем теперь dW к площади, приходящейся на угол $d\theta$, $dS = 2\pi \sin \theta d\theta$. Отсюда находим

$$|Y_{l0}|^2 = \frac{dW}{dS} = \frac{1}{2\pi^2 \sin \theta}.$$

При этом надо иметь в виду, что в действительности $Y_{l0}(\theta)$ — знакопеременная функция и имеет l узлов в интервале $0 \leq \theta \leq \pi$ (l узловых линий — параллелей); выписанное выше выражение представляет интерес, лишь поскольку мы отвлекаемся от этих колебаний. Для этого нужно, чтобы было $l \gg 1$ и при этом рассматривались бы интервалы $\Delta\theta > 1/l$.

Полезно отметить максимальную степень отклонения от сферической симметрии, возникающую при $m = 0$ и $l \gg 1$. Как видно из приведенного выражения, плотность минимальна на экваторе, при $\theta = \pi/2$ среднее $|Y_{l0}|^2$ равно $1/2\pi^2$ при среднем по сфере $1/4\pi$. Плотность в окрестности экватора меньше средней в $\pi/2$ раз. Заметим, что, строго говоря, с учетом тонкой структуры (узлов) плотность колеблется в пределах от 0 до $4/\pi$; при l нечетном на экваторе $\Theta \equiv 0$, при l четном $\frac{Y_{l0}}{1/4\pi} = \frac{4}{\pi}$, величина $2/\pi$ получается при усреднении по колебаниям. Замечательно, что существует такое асимптотическое значение, не зависящее от l , в пределе $l \gg 1$. В окрестности полюсов

$|Y_{l0}|^2 \rightarrow \infty$, когда $l \rightarrow \infty$. При конечном значении l максимум достигается при $\theta = 0$ и $\theta = \pi$:

$$|Y_{l0}(0, \varphi)|^2 = |Y_{l0}(\pi, \varphi)|^2 \approx \frac{l}{2\pi}.$$

Если на опыте угловое распределение вытянуто вдоль оси z сильнее и, в частности, в окрестности экватора меньше, чем на $2/\pi = 0,65$ среднего, то можно быть уверенным, что имеет место интерференция состояний с различными l .

Далее, асимметрия относительно экваториальной плоскости, т. е. асимметрия $z > 0$ и $z < 0$, очевидно, возможна лишь как результат интерференции состояний с четными и нечетными l .

В случае частицы со спином $1/2$ полный момент j — полуцелый. Каждое значение j может быть получено двумя способами: $j = l_1 + 1/2$ и $j = l_2 - 1/2$.

Волновые функции представляют собой произведения орбитальных и спиновых функций, взятые в соответствии с правилами сложения момента. Введем обозначения для спиновых функций:

$$\alpha \rightarrow s_z = \frac{1}{2}, \quad \beta \rightarrow s_z = -\frac{1}{2}.$$

Выпишем конкретно несколько первых волновых функций:

$$l = 0, j = \frac{1}{2}, (S_{1/2})$$

$$m = \frac{1}{2}, \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \alpha = Y_{0,0} \alpha,$$

$$m = -\frac{1}{2}, \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \beta = Y_{0,0} \beta;$$

$$l = 1, j = \frac{1}{2}, (P_{1/2})$$

$$m = \frac{1}{2}, \quad \psi = -\sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,0} \alpha + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,1} \beta,$$

$$m = -\frac{1}{2}, \quad \psi = -\sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,-1} \alpha + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,0} \beta;$$

$$l = 1, j = \frac{3}{2}, (P_{3/2})$$

$$m = \frac{3}{2}, \quad \psi = Y_{1,1}\alpha,$$

$$m = \frac{1}{2}, \quad \psi = \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,0}\alpha + \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,1}\beta,$$

$$m = -\frac{1}{2}, \quad \psi = \sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,0}\beta,$$

$$m = -\frac{3}{2}, \quad \psi = Y_{1,-1}\beta;$$

$$l = 2, j = \frac{3}{2}, (D_{3/2})$$

$$m = \frac{3}{2}, \quad \psi = -\sqrt{\frac{1}{5}} Y_{2,1}\alpha + \sqrt{\frac{4}{5}} Y_{2,2}\beta,$$

$$m = \frac{1}{2}, \quad \psi = -\sqrt{\frac{2}{5}} Y_{2,0}\alpha + \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{2,1}\beta,$$

$$m = -\frac{1}{2}, \quad \psi = -\sqrt{\frac{3}{5}} Y_{2,1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{5}} Y_{2,0}\beta,$$

$$m = -\frac{3}{2}, \quad \psi = -\sqrt{\frac{4}{5}} Y_{2,-2}\alpha + \sqrt{\frac{1}{5}} Y_{2,-1}\beta.$$

(2.1)

Замечательное свойство этих функций заключается в том, что полная плотность частиц после усреднения по направлениям спина зависит только от j и m , т. е. одинакова для $j = l_1 + 1/2$ и $j = l_2 - 1/2$. Так, например, для $j = 3/2$, $m = 3/2$ получим в первом случае ($P_{3/2}$)

$$|\psi|^2 = \frac{1}{4\pi} \frac{3}{2} \sin^2 \theta = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)\right),$$

во втором случае ($D_{3/2}$)

$$|\psi|^2 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta \sin^2 \theta + \frac{3}{2} \sin^4 \theta\right) = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)\right),$$

т. е. то же самое.

В частном случае $j = 1/2$ имеет место изотропия полной плотности не только для $S_{1/2}$ ($l = 0$), но и для $P_{1/2}$ ($l = 1$):

$$|\psi_{S_{1/2}}|^2 = |\psi_{P_{1/2}}|^2 = \frac{1}{4\pi}.$$

Различить $l_1 + 1/2$ и $l_2 - 1/2$ можно только путем поляризационных измерений, т. е. определяя как полную плотность частиц, так и их направление спина.

Интерференция между $l_1 + 1/2$ и $l_2 - 1/2$ создает асимметрию в полной плотности относительно экватора.

В частности, хотя состояния $S_{1/2}$ и $P_{1/2}$ каждое в отдельности изотропны, интерференция между ними создает анизотропию: максимум достигается для линейной комбинации

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{S_{1/2}} \pm \psi_{P_{1/2}}].$$

При этом $W = |\psi|^2 = \frac{1}{4\pi} (1 \mp \cos \theta)$.

Описанные выше свойства специфичны для частиц со спином $1/2$, но именно такие частицы играют наиболее важную роль.

Перейдем к рассмотрению радиальных волновых функций.

Практически все специфические ядерные взаимодействия являются короткодействующими, т. е. их можно полагать равными нулю вне некой сферы $r = R$. Входящий же в у. Ш. при $l \neq 0$ центробежный потенциал, напротив, простирается далеко за сферу $r = R$ и существенно изменяет вид волновой функции при $r > R$.

В области $r > R$ уравнение для χ_{kl} имеет вид

$$\chi_{kl}'' + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) \chi_{kl} = 0$$

и с помощью подстановки $\chi = \sqrt{r} Z$ сводится к уравнению Бесселя. Соответственно в этой области общее решение этого уравнения имеет вид

$$\chi_{kl}(r) = \sqrt{r} Z_{l+1/2}(kr),$$

где $Z_{l+1/2}$ — любая из бесселевых функций порядка $l + 1/2$.

В качестве двух независимых решений мы выберем

$$\left. \begin{aligned} \chi_{kl}^{(+)}(r) &= i \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(kr) \equiv (kr) h_l^{(1)}(kr), \\ \chi_{kl}^{(-)}(r) &= -i \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(2)}(kr) \equiv (kr) h_l^{(2)}(kr), \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

где $H^{(1)}$ и $H^{(2)}$ — функции Ганкеля*). При больших kr эти два решения ведут себя как

$$\chi_{kl}^{(\pm)}(r) \sim e^{\pm i \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right)} \quad (2.3)$$

и соответствуют сходящимся и расходящимся потокам частиц. Эти решения являются обобщением на случай $l \neq 0$ функций $\chi_{k0}^{(\pm)}$ и имеют тот же самый физический смысл. Функции непрерывного спектра, описывающие рассеяние частицы с моментом l , можно в полной аналогии с (1.6), (1.8) записать как

$$\left. \begin{aligned} \chi_{kl} &= A_l(k) (\chi_{kl}^{(-)} - S_l(k) \chi_{kl}^{(+)}), \\ \chi_{kl} &\sim -2i A_l(k) e^{i\delta_l} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right) \text{ при } r \rightarrow \infty. \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

Здесь $e^{2i\delta_l} \equiv S_l(k)$ играет ту же роль, что и S_0 для $l = 0$. Если потенциал U тождественно равен нулю, то выписанное выше выражение для волновой функции должно быть справедливым во всем пространстве. Функции $\chi_{kl}^{(\pm)}$, однако, при малых kr ведут себя как

$$\chi_{kl}^{(\pm)} \sim \frac{\Gamma \left(l + \frac{1}{2} \right)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{kr} \right)^l, \quad (2.5)$$

(Γ — это Γ -функция) и, очевидно, не удовлетворяют условию регулярности волновой функции в нуле. Обра-

*) Эти функции имеют вид полинома степени l от аргумента $1/kr$, умноженного на $e^{\pm i \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right)}$. Чтобы найти их в явном виде, можно использовать формулу

$$\chi_{kl}^{(\pm)}(r) = (-1)^l (kr)^{l+1} \left(\frac{d}{k^2 r dr} \right)^l \frac{e^{\pm ikr}}{kr}.$$

щается в нем в нуль лишь разность*)

$$\frac{1}{2i} (\chi_{kl}^{(+)} - \chi_{kl}^{(-)}) \equiv \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma \left(l + \frac{3}{2} \right)} \left(\frac{kr}{2} \right)^{l+1}, \quad (2.6)$$

где

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \equiv \frac{1}{2} \left(H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(kr) - H_{l+\frac{1}{2}}^{(2)}(kr) \right)$$

есть обычная функция Бесселя.

Сравнение (2.4) с (2.6) показывает, что в отсутствие потенциала фаза δ_l равна нулю и $S_l(k) = 1$, в полной аналогии с определениями § 1. Рассеивающая способность потенциала по-прежнему определяется величиной $|S_l(k) - 1|^2$. Что касается самой $S_l(k)$, то для ее вычисления необходимо знать решение $\chi_{kl}^{(0)}(r)$ у. Ш. в области действия потенциала ($r < R$). Как только это решение стало известно, $S_l(k)$ находится с помощью (1.11) гл. I, куда надо вместо $\chi_k^{(\pm)}$ и $\chi_k^{(0)}$ подставить их аналоги $\chi_{kl}^{(\pm)}$ и $\chi_{kl}^{(0)}$. Нетрудно видеть также, что формулы (1.18) — (1.26), определяющие нормировку функций, полученные ранее для случая $l = 0$, сохраняют силу и для функций χ_{kl} при произвольном l .

Итак, мы видим, что случай $l \neq 0$ отличается от разобранного в § 1 ($l = 0$) количественно, но не качественно. Физический смысл и качественные особенности решений у. Ш. в обоих случаях одни и те же.

До сих пор мы считали, что частица не заряжена. Рассмотрим теперь случай, когда, кроме потенциала $U(r)$, на частицу действуют кулоновские силы. Заряд частицы обозначим через e_1 , а заряд, находящийся в точке $r = 0$, через e_2 .

Суммарный потенциал, действующий на частицу, теперь равен

$$\left. \begin{aligned} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\eta k}{r} &\text{ при } r < R, \\ \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\eta k}{r} &\text{ при } r > R, \end{aligned} \right\} \quad (2.7)$$

где $\eta = \frac{e_1 e_2}{\hbar v}$, v — скорость частицы.

*) Такое поведение волновой функции при малых r нетрудно получить из уравнения (1.5) гл. I.

В области $r > R$ у. Ш. имеет вид

$$\chi_{kl}'' + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\eta k}{r} \right) \chi_{kl} = 0. \quad (2.8)$$

Свойства этого уравнения хорошо изучены. В качестве двух независимых его решений обычно выбирают так называемые регулярную и нерегулярную кулоновские функции $F_l(kr, \eta)$ и $G_l(kr, \eta)$. При $r \rightarrow \infty$ эти функции переходят в

$$\left. \begin{aligned} F_l &\sim \sin \left\{ kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l - \eta \ln 2kr \right\}, \\ G_l &\sim \cos \left\{ kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l - \eta \ln 2kr \right\}, \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

где $\eta_l = \arg \Gamma(l+1+i\eta)$. При $r \rightarrow 0$ F_l стремится к нулю как r^{l+1} , а G_l обращается в бесконечность как r^{-l} :

$$\left. \begin{aligned} F_l(kr, \eta) &\underset{r \rightarrow 0}{\sim} C_l (kr)^{l+1}, \\ G_l(kr, \eta) &\underset{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{(2l+1)C_l} (kr)^{-l}, \end{aligned} \right\} \quad (2.9')$$

где

$$C_l = \frac{2^l}{(2l+1)!} [(1^2 + \eta^2)(2^2 + \eta^2) \dots (l^2 + \eta^2)]^{1/2} C_0, \\ C_0 = \left[\frac{2\pi\eta e^{-2\pi\eta}}{1 - e^{-2\pi\eta}} \right]^{1/2}.$$

В дальнейшем нам будет удобнее пользоваться не самими кулоновскими функциями, а их линейными комбинациями:

$$\chi_{kl}^{(\pm)}(r) = G_l \pm iF_l \sim e^{\pm i \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l - \eta \ln 2kr \right)}. \quad (2.9'')$$

Эти функции, по аналогии с введенными выше функциями (2.3), описывают расходящиеся и сходящиеся потоки частиц (v частиц через сферу большого радиуса в 1 сек). В этом легко убедиться, вычислив соответствующие потоки. Член с $\ln 2kr$ в показателе экспоненты можно считать постоянным, так как при дифференцировании по r он дает добавку, обращаящуюся в нуль при $r \rightarrow \infty$ в r раз быстрее, чем основной член.

При положительных энергиях общее решение у. Ш. в области $r > R$ можно записать в полной аналогии с разобранными выше случаями:

$$\left. \begin{aligned} \chi_{kl}(r) &= A_l(k) (\chi_{kl}^{(-)}(r) - S_l \chi_{kl}^{(+)}(r)) \sim \\ &\sim -2i A_l(k) e^{i\delta_l} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \eta_l + \delta_l - \eta \ln 2kr \right), \\ S_l(k) &\equiv e^{2i\delta_l}. \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

Если потенциал $U(r)$ тождественно равен нулю, то решение (2.10) должно быть справедливым во всем пространстве. При этом $S_l \equiv 1$ и $\delta_l = 0$. Действительно, мы знаем, что лишь одна из кулоновских функций, F_l , регулярна в нуле. Это означает, что функция (2.10) не должна содержать G_l , т. е. $S_l = 1$.

При отличном от нуля $U(r)$ величина $S_l \neq 1$, и, следовательно, величина δ_l является характеристикой рассеивающей способности потенциала $U(r)$. Удобно переписать χ_{kl} , выделив из нее чисто «кулоновскую» часть:

$$\begin{aligned} \chi_{kl}(r) &= A_l(k) \{ \chi_{kl}^{(-)} - \chi_{kl}^{(+)} - (S_l - 1) \chi_{kl}^{(+)} \} = \\ &= A_l(k) \{ -2iF_l - (S_l - 1) \chi_{kl}^{(+)} \}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Последний член в этом выражении целиком обязан рассеянию на потенциале $U(r)$ и исчезает, когда потенциал равен нулю.

§ 3. Волновые функции непрерывного спектра. Сечение рассеяния

До сих пор мы рассматривали только состояние частицы с определенным моментом количества движения относительно начала координат. В задаче рассеяния, однако, речь идет о пучке частиц, распространяющихся с определенной скоростью вдоль заданного направления и рассеиваемых полем $U(r)$. Эта задача решается следующим образом*).

*) Излагаемый ниже общий способ решения задачи впервые применили Х. Факсен и И. Хольцмарк (1927); частный случай рассеяния звуковой волны на непроницаемой сфере рассматривался аналогичным методом еще ранее Рэлеем (1871).

Прямолинейно распространяющийся вдоль направления \mathbf{k} пучок частиц описывается плоской волной $e^{i\mathbf{k}r}$. Действительно, вычисляя поток, соответствующий плоской волне, получаем

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \mathbf{v}.$$

Такие частицы не обладают определенным значением момента относительно начала координат, так как плотность вероятности $|e^{i\mathbf{k}r}|^2 = 1$ одинакова во всем пространстве и, следовательно, говоря классическим языком, при заданной скорости возможны любые значения прицельного параметра. Долю состояний с различными значениями момента l относительно начала координат легко найти из известного разложения плоской волны по сферическим гармоникам:

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}r} &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l\left(\frac{\mathbf{k}r}{kr}\right) j_l(kr) = \\ &= \frac{1}{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{\pi(2l+1)} Y_{l0}\left(\frac{\mathbf{k}r}{kr}\right) (\chi_{kl}^{(+)}(r) - \chi_{kl}^{(-)}(r)). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь P_l — полиномы Лежандра, Y_{l0} — сферические гармоники, а $\chi_{kl}^{(\pm)}$ определены формулами (2.2). Из этого разложения мы видим, что в плоской волне каждая сходящаяся волна $\frac{\chi_{kl}^{(-)}}{r} Y_{l0}$ с моментом l входит с амплитудой C_l :

$$C_l = -\frac{1}{ik} i^l \sqrt{\pi(2l+1)}. \quad (3.2)$$

В классической физике момент количества движения частиц относительно некой точки $r=0$ равен $\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$, а его проекция на направление движения равна нулю. Это утверждение остается справедливым и в квантовой механике: функция $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ соответствует состоянию с моментом l и его проекцией m на ось квантования (т. е. на направление движения частиц в принятой нами системе координат). То, что $e^{i\mathbf{k}r}$ раскладывается исключительно по Y_{l0} , как раз и соответствует тому, что поток частиц, движущихся вдоль \mathbf{k} , содержит различные значения мо-

мента l относительно точки $r=0$, но проекция момента на направление \mathbf{k} равна нулю.

Формула (3.2) означает, что волновая функция, описывающая рассеяние прямолинейно распространяющегося пучка частиц, должна иметь вид

$$\psi_{\mathbf{k}}(r) = \sum C_l Y_{l0}\left(\frac{\mathbf{k}r}{kr}\right) \frac{1}{r} (\chi_{kl}^{(-)} - S_l \chi_{kl}^{(+)}). \quad (3.3)$$

Действительно, падающие на силовой центр волны (т. е. члены при $\chi^{(-)}$), очевидно, имеют ту же самую амплитуду, что и волны, распространяющиеся в свободном пространстве; перед амплитудами расходящихся волн (т. е. перед $\chi^{(+)}$), однако, из-за действия потенциала $U(r)$ появится фазовый множитель $S_l = e^{2i\delta_l}$.

Формулу (3.3) для $\psi_{\mathbf{k}}$ удобно переписать, выделив из нее часть, описывающую рассеянные частицы:

$$\psi_{\mathbf{k}}(r) = e^{i\mathbf{k}r} + \sum_l C_l Y_{l0}\left(\frac{\mathbf{k}r}{kr}\right) (1 - S_l) \frac{1}{r} \chi_{kl}^{(+)} \sim e^{i\mathbf{k}r} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r}, \quad (3.4)$$

где $f(\theta)$ — так называемая амплитуда рассеяния:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_{l0}\left(\frac{\mathbf{k}r}{kr}\right) (S_l - 1), \quad \cos \theta = \frac{\mathbf{k}r}{kr}. \quad (3.5)$$

Если потенциал $U(r)$ тождественно равен нулю, то все S_l равны единице, $f(\theta) = 0$ и рассеяние частиц отсутствует. Если же потенциал не равен нулю, то $f(\theta) \neq 0$.

Вычислим поток частиц, рассеянных на угол θ и выходящих из сферы большого радиуса через элемент поверхности $r^2 \sin \theta d\theta d\varphi = r^2 d\Omega$. Рассеянные частицы описываются членом $f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r}$. Соответствующий поток частиц равен

$$j(\theta) d\Omega = v |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Для характеристики рассеивающей способности потенциала вводится так называемое сечение рассеяния $\sigma(\theta)$. Оно определяется как величина потока рассеянных частиц в телесном угле $d\Omega$, вызываемого единичным

потоком частиц $\left(1 \frac{\text{частица}}{\text{см}^2 \cdot \text{сек}}\right)$, падающих на силовой центр. Падающий поток j равен v . Таким образом, сечение рассеяния в потенциальном поле $U(r)$ равно

$$\sigma(\theta) d\Omega = |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (3.6)$$

Проинтегрировав по всем углам, мы получим полное сечение рассеяния *)

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \sigma(\theta) d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |S_l - 1|^2 = \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \end{aligned} \quad (3.7)$$

которое является суммой сечений в состояниях с различными l :

$$\sigma = \sum_l \sigma_l, \quad \sigma_l \equiv \frac{\pi(2l+1)}{k^2} |S_l - 1|^2. \quad (3.8)$$

Сечение рассеяния под данным углом $\sigma(\theta)$ (так называемое дифференциальное сечение) нельзя представить в таком простом виде. Дело в том, что $\sigma(\theta)$ имеет, как видно из (3.5) и (3.6), вид

$$\sigma(\theta) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l, l_1} \sqrt{(2l+1)(2l_1+1)} Y_{l0} Y_{l_1 0}^* (S_l - 1)(S_{l_1}^* - 1),$$

т. е. содержит интерференционные члены $Y_{l0} Y_{l_1 0}^*$ между состояниями с различными орбитальными моментами l . Интерференционные члены исчезают лишь при интегрировании по всем углам как результат ортогональности сферических гармоник.

*) В классической механике сечение $\sigma = \infty$, если потенциал $U(r)$ не обращается в нуль при r , большем некоторого R . Замечательной особенностью квантовой механики является конечность сечения для потенциалов, падающих быстрее, чем $1/r$. Как нетрудно видеть, существенное различие между сечениями в обоих случаях возникает при рассеянии на малые углы.

Функции $\psi_k(r)$ можно преобразовать к очень наглядному виду. Это преобразование совершается с помощью формулы

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(nn_1) &\equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\pi(2l+1)} Y_{l0}(nn_1) = \\ &= 2\pi \delta(1 - nn_1) = 2\pi \delta(n - n_1), \end{aligned} \quad (3.9)$$

где n и n_1 — любые единичные векторы, а $\delta(n - n_1)$ — δ -функция. Формулу (3.9) легко проверить, умножив обе стороны на $Y_{l_1 0}(nn_1)$ и проинтегрировав по всем направлениям одного из векторов, скажем, n : $dn = \sin \theta d\theta d\varphi$.

Из (3.1) и (3.4) с помощью (3.9) и из известного соотношения $Y_{l_1 0}(-nn_1) = (-1)^{l_1} Y_{l_1 0}(nn_1)$ немедленно получаем, что при больших r

$$\begin{aligned} \psi_k(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} &= \frac{2\pi}{ikr} \left\{ -\delta(n + n_1) e^{-ikr} + \right. \\ &\left. + \left[\delta(n - n_1) + \frac{ik}{2\pi} f(nn_1) \right] e^{ikr} \right\}; \end{aligned} \quad (3.10)$$

здесь $n = k/k$; $n_1 = r/r$.

Смысл (3.10) очевиден: сходящийся поток частиц имеет амплитуду, отличную от нуля лишь при $n_1 = -n$, что и соответствует частицам, движущимся по направлению k к началу координат. Амплитуда расходящихся частиц делится на две части: нерассеянные частицы, удаляющиеся от начала координат в направлении n , и рассеянные во всех направлениях частицы, описываемые членом $\frac{ik}{2\pi} f(nn_1)$.

Перейдем теперь к построению полной ортонормированной системы волновых функций. Вычислим для этого интеграл:

$$\begin{aligned} \int \psi_k(r) \psi_{k_1}(r) dr &= (2\pi)^3 \sum_{l, l_1} \frac{i^{l-l_1}}{16\pi^2 k k_1} 4\pi \sqrt{(2l+1)(2l_1+1)} \times \\ &\times e^{i(\delta_l(k) - \delta_{l_1}(k))} \int_0^\infty \chi_{kl}(r) \chi_{k_1 l_1}^*(r) dr \int d\Omega_r Y_{l_1 0} \left(\frac{kr}{kr} \right) Y_{l_1 0}^* \left(\frac{k_1 r}{k_1 r} \right). \end{aligned}$$

Интеграл по углам берется элементарно:

$$\int d\Omega_r Y_{l0} \left(\frac{\mathbf{k}r}{kr} \right) Y_{l0}^* \left(\frac{\mathbf{k}_1 r}{k_1 r} \right) = \delta_{ll_1} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l0} \left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}{kk_1} \right).$$

Вспомнив также, что радиальные функции нормированы на $\delta(k - k_1)$ -функцию, получаем

$$\int dr \psi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}_1}^* = (2\pi)^2 \frac{\delta(k - k_1)}{k^2} \sum_l \sqrt{\pi(2l+1)} Y_{l0} \left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}{kk_1} \right) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1). \quad (3.11)$$

Таким образом, совокупность функций $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \psi_{\mathbf{k}}$

при всех значениях вектора \mathbf{k} образует ортонормированную систему. Однако эта система не является, вообще говоря, полной. В самом деле, помимо состояний непрерывного спектра при некоторых дискретных отрицательных значениях энергии E_{nl} (или соответствующих им мнимых волновых векторах $k_{nl} = i\chi_{nl}$), возможны решения

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \chi_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$\int \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \psi_{n_1 l_1 m_1}^*(\mathbf{r}) dr = \delta_{nn_1} \delta_{ll_1} \delta_{mm_1},$$

описывающие связанные состояния частицы в поле $U(r)$ с орбитальным моментом l и его проекцией m . Кроме того, из предыдущего параграфа мы знаем, что функции дискретного и непрерывного спектров ортогональны друг другу: $\int \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) dr = 0$. Известно, что функции

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \text{ и } \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (3.12)$$

составляют полный набор функций у. Ш., удовлетворяющих условиям конечности и непрерывности во всем пространстве. Выпишем условие ортонормированности этого набора функций:

$$\left. \begin{aligned} \int dr \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \psi_{n_1 l_1 m_1}^*(\mathbf{r}) &= \delta_{nn_1} \delta_{ll_1} \delta_{mm_1}, \\ \int dr \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^{(+)*}(\mathbf{r}) &= 0, \\ \int dr \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)*}(\mathbf{r}) &= \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1). \end{aligned} \right\} \quad (3.13)$$

Из условия полноты следует, что любая функция $\varphi(\mathbf{r})$, интеграл от квадрата модуля которой есть конечная величина, может быть разложена по этому набору:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{nlm} C_{nlm} \psi_{nlm}(\mathbf{r}) + \int dk C(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

где, как легко убедиться, умножая это равенство на $\psi_{nlm}^*(\mathbf{r})$ или $\psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)*}(\mathbf{r})$ и интегрируя по \mathbf{r} ,

$$\left. \begin{aligned} C_{nlm} &= \int dr \varphi(\mathbf{r}) \psi_{nlm}^*(\mathbf{r}), \\ C(\mathbf{k}) &= \int dr \varphi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^{(+)*}(\mathbf{r}). \end{aligned} \right\} \quad (3.15)$$

Совершенно очевидно, что выбор полной системы функций можно сделать бесконечным числом способов. Действительно, в качестве такой системы можно, например, выбрать функции

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \text{ и } \psi_{klm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \chi_{kl}(r) Y_{lm} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) \quad (3.16)$$

или любые их линейные комбинации. Одной из таких комбинаций функций $\psi_{klm}(\mathbf{r})$ и являются введенные нами выше $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$.

Наряду с $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ иногда приходится пользоваться системой функций

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) \equiv \psi_{-\mathbf{k}}^{(+)*}(\mathbf{r}). \quad (3.17)$$

Эти функции имеют вид

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(-)} = \frac{1}{4\pi k} \sum_l i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_{l0} \left(\frac{\mathbf{k}r}{kr} \right) e^{-i\delta_l(k)} \frac{1}{r} \chi_{kl}(r). \quad (3.18)$$

Их физический смысл легко понять из асимптотического вида

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) &\sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{ikr} + f^* \left(-\frac{\mathbf{k}r}{kr} \right) \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \sim \\ &\sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{2\pi}{ikr} \left\{ - \left[\delta(n+n_1) - \frac{ik}{2\pi} f^*(-n, n_1) \right] e^{-ikr} + \right. \\ &\quad \left. + \delta(n-n_1) e^{ikr} \right\} \text{ при } r \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Видно, что хотя сходящиеся на силовой центр частицы движутся со всех направлений, но фазовые соотношения

между амплитудами падающих волн с различными l таковы, что расходящиеся рассеянные частицы вылетают лишь в направлении вектора \mathbf{k} ; таким образом, после рассеяния сходящийся поток частиц «вытягивается» в направленный пучок*).

Применяя к формулам, приведенным в первой половине параграфа, операцию комплексного сопряжения и изменяя в них знак \mathbf{k} , легко убедиться в том, что функции

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \text{ и } \psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) \quad (3.20)$$

являются ортонормированными и составляют полный набор решений у. Ш. (1.2') гл. I.

Уже из самого смысла функций $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ видно, когда удобнее пользоваться набором (3.12), когда — набором (3.16), а когда — набором (3.20). При разложении какого-то состояния $\varphi(\mathbf{r})$ по решениям у. Ш. удобно пользоваться первым набором, если нас интересует вопрос: какому распределению (по энергии и направлениям) падающих потоков частиц соответствует состояние $\varphi(\mathbf{r})$. Когда нас интересует распределение частиц по состояниям с заданными l , m и \mathbf{k} , удобно пользоваться набором (3.16). Наконец, если мы хотим знать распределение по направлениям и интенсивности расходящихся частиц, удобно пользоваться полной системой (3.20).

Пусть, например, каким-то образом в потенциале $U(r)$ создано состояние $\varphi(\mathbf{r})$ и мы хотим знать, сколько частиц с волновым вектором \mathbf{k} летит из начала координат. Это число, очевидно, определяется квадратом модуля коэффициента

$$C^{(-)}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r}),$$

* Заметим, что состояния $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ (их часто называют in и out состояниями соответственно) при $r \rightarrow \infty$ переходят в собственные функции свободного гамильтониана $H_0 = p^2/2m$. Таким образом, в нашем случае полный гамильтониан H естественно разбивается на H_0 и V . Можно, однако, развить теорию рассеяния, не используя разбиения гамильтониана на две части (Х. Экштейн, 1956). Читателя, интересующегося строгой теорией рассеяния, мы отсылаем к обзору В. Бренига и Р. Хаага (1959).

если мы пользуемся набором (3.20). Если бы мы пользовались набором (3.12), то $C^{(-)}(\mathbf{k})$ также можно было бы определить, но только более сложным путем: сначала пришлось бы разложить $\varphi(\mathbf{r})$ по $\psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}$ и найти коэффициенты

$$C^{(+)}(\mathbf{k}_1) = \int d\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)*}(\mathbf{r}),$$

а затем уже искать $C^{(-)}(\mathbf{k})$, используя полученное разложение:

$$C^{(-)}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} \left\{ \int d\mathbf{k}_1 C^{(+)}(\mathbf{k}_1) \psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r}).$$

Принципиально, конечно, этот путь ничем не хуже предыдущего, но технически он неизмеримо и, главное, неоправданно сложнее.

Приведем еще одну формулу, являющуюся следствием полноты решений у. Ш.:

$$\sum_{nlm} \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \psi_{nlm}^*(\mathbf{r}_1) + \int d\mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)*}(\mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1). \quad (3.21)$$

§ 4. Оптическая теорема и ее обобщение

Как было показано в предыдущем параграфе, рассеяние частицы в потенциальном поле описывается волновой функцией

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}/r, \quad \text{где } \mathbf{n} = \mathbf{k}/k, \quad \mathbf{n}' = \mathbf{r}/r.$$

Первый член в этой функции описывает проходящую волну, второй — рассеянную волну. Поэтому на первый взгляд кажется, что здесь имеется парадокс: мимо рассеивателя проходит пучок частиц, да еще некоторый поток частиц рассеивается полем. Последние как бы возникают из ничего. Как же быть здесь с законом сохранения числа частиц или, что то же самое, с сохранением вероятности (с унитарностью)? Правильный ответ заключается в том, что существует интерференция между падающей волной и волной, рассеянной на угол 0, и эта интерференция приводит к выбыванию проходящих

частиц из пучка. Для более ясного понимания механизма рассеяния найдем в пределе при $r \rightarrow \infty$ поток $\mathbf{j}(r)$, соответствующий этой функции. Оставляя лишь наиболее медленно убывающие члены, получаем

$$\hat{p}\psi_k = -i\hbar\nabla\psi_k = \hbar k n e^{ikr} + \hbar k n' \frac{f^i}{r} e^{ikr}. \quad (4.1)$$

Подставляя это выражение в формулу (1.1) для тока, находим

$$\frac{m}{\hbar} \mathbf{j} = kn + \frac{1}{2} \frac{k}{r} (n + n') [f e^{-i(kr-kr)} + f^* e^{i(kr-kr)}] + kn' \frac{|f|^2}{r^2}. \quad (4.2)$$

Наконец, используя тождество

$$\lim_{r \rightarrow \infty} e^{ikn'n'r} = \frac{2\pi i}{k} \left[\delta(n + n') \frac{e^{-ikr}}{r} - \delta(n - n') \frac{e^{ikr}}{r} \right], \quad (4.3)$$

получаем

$$\frac{m}{\hbar} \mathbf{j} = kn - kn \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(n', n) \frac{\delta(n - n')}{r^2} + kn' \frac{|f(nn')|^2}{r^2}. \quad (4.4)$$

Все три члена формулы (4.4) имеют простой физический смысл: первый член описывает поток падающих частиц; второй член, возникающий вследствие интерференции падающей и рассеянной волн, приводит к уменьшению потока частиц, движущихся в первоначальном направлении, т. е. к ослаблению пучка частиц вследствие рассеяния; наконец, последний дает просто поток рассеянных частиц.

Проинтегрируем теперь обе части (4.4) по сфере большого радиуса $r = R$ и преобразуем интеграл в левой части в интеграл по объему V , заключенному внутри сферы S :

$$\int_S \mathbf{j} dS = \int_V \text{div} \mathbf{j} dr. \quad (4.5)$$

Однако в стационарном состоянии $\text{div} \mathbf{j} = 0$, что следует, например, из уравнения непрерывности $\text{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$,

поскольку $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$. Выражение (4.5) принимает теперь вид

$$0 = 0 - \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(n, n) + \int |f(n, n')|^2 dn'. \quad (4.6)$$

Но последний член в (4.6) есть просто сечение рассеяния σ , и поэтому

$$\text{Im} f(n, n) = \frac{k}{4\pi} \sigma. \quad (4.7)$$

Мы получили так называемую «оптическую теорему», установленную впервые Е. Финбергом (1932). Эта важная теорема связывает полное сечение с мнимой частью амплитуды рассеяния вперед. Как мы уже видели, левая часть (4.7) возникает как результат интерференции между амплитудами нерассеянных частиц и частиц, рассеянных под углом $\theta = 0$ к падающему пучку. Иными словами, «оптическая теорема» — это квантовомеханический эффект, связанный с волновым характером движения частиц.

Очевидно, что проведенное выше рассуждение справедливо как для функций $\psi_k(r)$, так и для любых их линейных комбинаций

$$\psi(r) = \int A(n) \psi_{kn}(r) dn. \quad (4.8)$$

В этом случае требование равенства нулю интеграла от потока при произвольных $A(n)$ приводит к следующему обобщению оптической теоремы:

$$\text{Im} f(n, n') = \frac{k}{4\pi} \int dn'' f(n, n'') f^*(n', n''). \quad (4.9)$$

Проверку этого тождества предоставляем читателю.

Перейдем теперь к рассмотрению другой, более интересной возможности обобщения «оптической теоремы», указанной Б. Липпманом (1965).

Эта обобщенная «оптическая теорема» справедлива не только для случая рассеяния одной частицы в потенциальном поле, но и в ряде других случаев. Рассмотрим поэтому общий случай. Пусть мы имеем гамильтониан

$H = H_0 + H_1$, где за рассеяние ответственна часть H_1 . Волновая функция $\psi^{(+)}$, аналогичная старой функции $\psi_a^{(+)}$ и удовлетворяющая у. Ш. $(E - H_0)\psi^{(+)} = H_1\psi^{(+)}$, имеет вид

$$\psi^{(+)} = \Phi + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} H_1 \psi^{(+)}, \quad (4.10)$$

где функция Φ является решением уравнения $H_0\Phi = E\Phi$ и аналогична падающей волне; функции Φ при этом образуют полную систему (Б. Липпман, Ю. Швингер, 1950).

Возьмем произвольный оператор A , коммутирующий с H_0 . Пусть Φ_a — собственная функция этого оператора: $A\Phi_a = A_a\Phi_a$, и пусть этой функции соответствует функция $\psi_a^{(+)}$.

Найдем среднее значение оператора $\dot{A} = \frac{1}{i\hbar} [A, H]$ в состоянии $\psi_a^{(+)}$:

$$(\psi_a^{(+)}, \dot{A}\psi_a^{(+)}) = (\psi_a^{(+)}, \frac{1}{i\hbar} [A, H_1] \psi_a^{(+)}) . \quad (4.11)$$

Подчеркнем то обстоятельство, что, вообще говоря, это выражение, в отличие от аналогичного выражения в случае дискретного спектра, не равно нулю, поскольку формально оно равно разности двух выражений, каждое из которых равно бесконечности и потому не имеет смысла.

Используя свойство полноты функций Φ_b , перепишем (4.11) в виде

$$\begin{aligned} (\psi_a^{(+)}, \frac{1}{i\hbar} [A, H_1] \psi_a^{(+)}) &= \frac{2}{\hbar} \sum_b A_b \operatorname{Im} (\psi_a^{(+)} \Phi_b) T_{ba} = \\ &= \frac{2}{\hbar} \sum_b A_b \operatorname{Im} T_{ba} \left\{ \delta_{ba} + \frac{T_{ba}^*}{E_a - E_b - i\varepsilon} \right\}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

где величина

$$T_{ba} \equiv (\Phi_b, H_1 \psi_a^{(+)}) = (\psi_b^{(-)}, H_1 \Phi_a)$$

определяет вероятность W_{ba} перехода из состояния a в состояние b в единицу времени:

$$W_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a). \quad (4.13)$$

С помощью равенства

$$\frac{1}{x - i\varepsilon} = P \frac{1}{x} + i\pi\delta(x)$$

преобразуем правую часть тождества (4.12) к виду

$$\frac{2}{\hbar} A_a \operatorname{Im} T_{aa} + \frac{2\pi}{\hbar} \sum_b A_b |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a). \quad (4.14)$$

Если A — единичный оператор, то мы получаем обычную «оптическую теорему» (записанную, правда, в других обозначениях)

$$\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} T_{aa} + \frac{2\pi}{\hbar} \sum_b |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a) = 0. \quad (4.15)$$

Находя отсюда $\operatorname{Im} T_{aa}$ и подставляя это выражение в (4.14), получаем

$$\begin{aligned} (\psi_a^{(+)}, \frac{1}{i\hbar} [A, H_1] \psi_a^{(+)}) &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_b (A_b - A_a) |T_{ab}|^2 (E_b - E_a) = \\ &= \sum_b (A_b - A_a) W_{ba}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Это и есть искомое обобщение «оптической теоремы». Формула (4.16) позволяет выразить вероятность изменения величины A в единицу времени в процессе рассеяния (правая часть равенства) через среднее значение некоторого оператора (левая часть равенства).

Рассмотрим один частный случай. Пусть $H_1 = V$, а в качестве оператора A выберем оператор импульса \hat{p} . Соотношение (4.16) принимает теперь следующий вид:

$$(\psi_a^{(+)}, (-\nabla V) \psi_a^{(+)}) = \sum_b (p_b - p_a) W_{ba}. \quad (4.17)$$

Мы пришли к теореме о среднем передаваемом импульсе в процессе рассеяния, впервые доказанной в работе Е. Герджоя (1965).

ГЛАВА III

АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

§ 1. S-матрица и ее аналитические свойства

В предыдущей главе было показано, что рассеяние частицы в потенциальном поле полностью определяется величинами $S_l(k) = \exp(2i\delta_l(k))$.

Если нам точно известно, какой вид имеет потенциал взаимодействия между частицами, то, решая аналитически или численно уравнение Шредингера, мы узнаем все об интересующей нас системе. Если бы так было всегда, то люди со спокойной совестью могли бы передать все задачи квантовой механики электронным машинам, а сами занялись бы более интересными делами. Однако реальное положение в физике сейчас не достигло такого состояния. В подавляющем большинстве случаев неизвестен вид взаимодействия между частицами. Более того, взаимодействие между частицами, по-видимому, не является потенциальным.

Взаимодействия, не сводящиеся к потенциальному, рассматриваются в так называемой квантовой теории поля. (Простейшие задачи такого типа будут рассмотрены в гл. XI.) Эта теория, однако, в отличие от квантовой механики, не свободна от внутренних трудностей. Так, например, при вычислении ряда величин появляются бесконечности. Эти бесконечности, по-видимому, связаны с неправильным описанием взаимодействия на очень малых расстояниях.

В связи с этим В. Гейзенберг (1943) выдвинул программу, согласно которой эти трудности приписываются тому обстоятельству, что в теории используются ненаблюдаемые величины, такие, например, как $\psi(\mathbf{r})$, и что в правильной теории мы должны иметь дело лишь с наблюдаемыми величинами. К ним относятся величины

$S_l(k) = \exp(2i\delta_l(k))$, которые образуют так называемую S-матрицу (матрицу рассеяния) (Дж. Уилер, 1937). Теория S-матрицы в последние годы интенсивно разрабатывалась, особенно в связи с необходимостью описания сильных взаимодействий элементарных частиц. При этом особое внимание было уделено построению S-матричной теории на основе использования свойств унитарности и аналитичности. (Заметим, что важность изучения свойств аналитичности S-матрицы подчеркивалась еще Х. Крамерсом (1938) и В. Гейзенбергом (1946).) На этом пути удастся достичь многих важных результатов о связях между различными наблюдаемыми на опыте величинами. Так, в теории элементарных частиц большой прогресс в последние годы достигнут именно благодаря умелому использованию аналитических свойств S-матрицы. Кроме того, в случае квазистационарных состояний и в некоторых других случаях поведение системы можно описать, не используя конкретного вида взаимодействия, а исходя лишь из общих соображений о расположении полюсов амплитуды рассеяния.

Обычно считается, что S-матричный формализм не допускает пространственно-временного описания процессов. Отметим в связи с этим работы (М. Гольдбергер, К. Ватсон, 1962; М. Фруассар, М. Гольдбергер, К. Ватсон, 1963), в которых показано, как определить пространственно-временное разделение событий в рамках формализма S-матрицы. В работах М. Гольдбергера, Х. Льюиса и К. Ватсона (1963), М. Гольдбергера и К. Ватсона (1964) была установлена также возможность использования корреляций интенсивности для определения фазы амплитуды рассеяния.

При рассмотрении аналитических свойств величин мы будем исходить из нескольких общих положений:

- а) все собственные значения энергии действительны (эрмитовость гамильтониана); при этом волновой вектор k автоматически будет действительным в случае волновых функций непрерывного спектра;
- б) невозможны никакие процессы, кроме упругого рассеяния;
- в) гамильтониан инвариантен по отношению к инверсии пространственных координат (сохраняется

пространственная четность) и к обращению времени (сохраняется временная четность).

Предположение б) необходимо нам, чтобы при заданной энергии существовало только одно решение радиального у.Ш. с данным l . Сохранение временной четности эквивалентно требованию вещественности гамильтониана ($H^* = H$); отсюда непосредственно следует, что если ψ есть решение у. Ш., то ψ^* также является его решением.

По поводу предположений о сохранении пространственной и временной четностей следует заметить, что несохранение первой из них в так называемых слабых взаимодействиях было поставлено под сомнение Т. Ли и Чж. Янгом (1956) и было продемонстрировано в опыте Цз. Ву и др. (1957). Затем было обнаружено также нарушение закона сохранения временной четности (Дж. Кристенсон и др., 1964).

До сих пор не обнаружено нарушения законов сохранения пространственной и временной четностей в сильных взаимодействиях. Поэтому к ним полностью применимы все полученные ниже теоремы.

Перейдем к рассмотрению общих свойств величин $S_l(k)$, входящих в амплитуду рассеяния *).

Мы видели, что для потенциалов $U(r)$, падающих на бесконечности быстрее, чем $1/r$, у.Ш. имеет два решения $\chi_{kl}^{(\pm)}$, ведущих себя асимптотически как

$$\chi_{kl}^{(\pm)} \sim e^{\pm i \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right)}$$

(кулоновский случай пока оставляем в стороне).

Из них можно построить регулярное в нуле решение **)

$$\chi_{kl} = a_l(k) \chi_{kl}^{(-)}(r) - b_l(k) \chi_{kl}^{(+)}(r), \quad (1.1)$$

*) Более детальное рассмотрение аналитических свойств волновых функций и величин $S_l(k)$ можно найти в обзоре А. Мартэна (1961) и книгах В. де Альфаро и Т. Редже (1965), Р. Ньютона (1966).

***) Это решение можно нормировать условием, не зависящим от k , например $\lim_{r \rightarrow 0} r^{-(l+1)} \chi_l(r) = 1$. В этом случае, согласно теореме А. Пуанкаре (1884) $\chi_l(r)$ будет целой функцией k^2 .

где a_l и b_l — некоторые постоянные, зависящие лишь от k . Чтобы эта функция обращалась в нуль при $r = 0$, a_l и b_l должны, очевидно, удовлетворять соотношению

$$\frac{b_l(k)}{a_l(k)} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\chi_{kl}^{(-)}(r)}{\chi_{kl}^{(+)}(r)}. \quad (1.2)$$

Из определения величин $S_l(k)$ непосредственно следует

$$S_l(k) = \frac{b_l(k)}{a_l(k)}. \quad (1.3)$$

Рассмотрим общие свойства инвариантности у.Ш. Прежде всего, так как волновой вектор k входит в него лишь квадратично, то уравнение инвариантно относительно изменения знака k . Это означает, что если в решении (1.1) заменить k на $-k$, то полученная функция будет по-прежнему являться решением исходного уравнения. В силу однозначности решения, однако, оба сконструированных нами решения χ_{kl} и χ_{-kl} могут отличаться лишь постоянным множителем. Так как из асимптотического вида функций $\chi_{kl}^{(\pm)}$ следует соотношение

$$\chi_{kl}^{(\pm)}(r) = (-1)^l \chi_{-kl}^{(\mp)}(r), \quad (1.4)$$

то мы сразу же получаем, меняя знак k в (1.1):

$$\frac{a_l(k)}{b_l(k)} = \frac{b_l(-k)}{a_l(-k)}.$$

Формула (1.3) дает нам соотношение

$$S_l(k) = S_l^{-1}(-k). \quad (1.5)$$

Еще одну важную формулу можно получить, заметив, что в силу действительности у.Ш. при действительных k комплексно сопряженное решение $\chi_{kl}^*(r)$ также должно быть решением у.Ш. В силу единственности решения мы снова заключаем, что χ_{kl} и χ_{kl}^* должны отличаться друг от друга лишь постоянным множителем, откуда непосредственно следует, что при действительных k

$$\frac{a_l(k)}{b_l(k)} = \frac{b_l^*(k)}{a_l^*(k)},$$

т. е.

$$S_l(k) = (S_l^{-1}(k))^* \quad (1.6)$$

Эта формула означает, что две функции $S_l(k)$ и $(S_l^{-1}(k))^*$ совпадают на всей действительной оси в комплексной плоскости k . Согласно известным теоремам об аналитическом продолжении отсюда следует, что равенство

$$S_l(k) = (S_l^*(k^*))^{-1} \quad (1.7)$$

выполняется во всей комплексной плоскости волновых векторов k . Формулы, полученные выше, устанавливают взаимно однозначное соответствие между значениями $S_l(k)$ в различных квадрантах плоскости k (рис. 8): если в точке k_0 величина $S_l(k_0)$ имеет значение S_0 , то

$$S_l(k_0^*) = \frac{1}{S_0^*}, \quad S_l(-k_0^*) = S_0^*, \quad S_l(-k_0) = \frac{1}{S_0}. \quad (1.8)$$

Таким образом, достаточно знать вид $S_l(k)$ в каком-либо одном квадранте, чтобы восстановить вид функции $S_l(k)$ во всей комплексной области. Полученные соотношения показывают, что в точках, симметричных относительно мнимой оси, функция $S_l(k)$ принимает комплексно сопряженные значения. На самой мнимой оси, следовательно, $S_l(k)$ является действительной функцией, а фаза $\delta_l(k)$ чисто мнима:

$$\delta_l(\pm i|k|) = -\delta_l^*(\pm i|k|). \quad (1.9)$$

Для точек, расположенных симметрично относительно действительной оси, выполняется равенство (1.7). Отсюда мы получаем известный результат: на действительной оси $|S_l(k)| = 1$, следовательно, фаза $\delta_l(k)$ действительна.

Перейдем теперь к вопросу о расположении особенностей $S_l(k)$. Регулярное в нуле решение (1.1) можно

рассматривать во всей комплексной плоскости k , понимая под $\chi_{kl}^{(\pm)}$ аналитические продолжения соответствующих функций в область комплексных k . В частности, регулярное в нуле решение имеет вид (1.1) и на мнимой оси. Пусть потенциал $U(r)$ таков, что при некоей отрицательной энергии $-E_0$ (или мнимом $k_0 = i|k_0|$) существует связанное состояние частицы. Это означает, что при энергии E_0 имеется регулярное в нуле решение, затухающее на бесконечности как $e^{ik_0r} = e^{-|k_0|r}$. Поскольку χ_{kl} — единственное регулярное в нуле решение, то существование связанного состояния подразумевает, что коэффициент $a_l(k)$ обращается в нуль при $k = k_0 = i\sqrt{\frac{2m|E_0|}{\hbar^2}}$; $\chi_{kl}^{(+)}$ в этой точке регулярна в нуле. Аналогично, так как для всех значений k , лежащих на нижней половине мнимой оси ($k = -i|k|$),

$$\chi_{kl}^{(+)}(r) \rightarrow \infty \text{ при } r \rightarrow \infty, \quad \chi_{kl}^{(-)}(r) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty,$$

то существование связанного состояния подразумевает обращение в нуль коэффициента $b_l(k)$ в точке $k = -k_0$. Это является отражением отмеченного выше общего свойства инвариантности у. Ш. относительно изменения знака k . Обращаясь к (1.3), мы приходим к заключению, что связанному состоянию соответствует полюс функции $S_l(k)$, расположенный на верхней половине мнимой оси в точке $k = k_0$.

Соответственно установленным выше свойствам симметрии $S_l(k)$, этому полюсу соответствует нуль функции $S_l(k)$ на нижней половине мнимой оси в точке $k = -k_0$. Заметим тут же, что хотя каждому связанному состоянию соответствует полюс, обратное утверждение, вообще говоря, несправедливо: не каждому полюсу $S_l(k)$ на верхней мнимой полуоси соответствует связанное состояние. Имеются так называемые «ложные» полюса $S_l(k)$. Ниже мы еще вернемся к этому вопросу.

Легко видеть далее, что $S_l(k)$ в верхней полуплоскости может иметь полюса только на мнимой оси, и соответственно в нижней полуплоскости нули могут быть расположены также только на мнимой оси. Действительно, с точностью до несущественного общего множителя

регулярное в нуле решение (1.1) можно записать либо как

$$\chi_{kl}(r) = \chi_{kl}^{(-)}(r) - S_l(k) \chi_{kl}^{(+)}(r), \quad (1.10)$$

либо как

$$\chi_{kl}(r) = S_l^{-1}(k) \chi_{kl}^{(-)} - \chi_{kl}^{(+)}. \quad (1.10')$$

Если бы величина $S_l(k)$ имела полюс в верхней полуплоскости в точке $k = k_0$, расположенной не на мнимой оси, то в этой точке решение (1.10') содержало бы только функцию $\chi_{kl}^{(+)}$ которая экспоненциально затухает на бесконечности:

$$\chi_{kl}(r) \sim -(-i)^l e^{ik_0 r} = -(-i)^l e^{(-ir \operatorname{Re} k_0 + r \operatorname{Im} k_0)}.$$

Но функция $\chi_{kl}(r)$ по определению регулярна в нуле, поэтому в точке k_0 это решение удовлетворяло бы обоим граничным условиям. (1.7) гл. I, т. е. комплексная величина $\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$ была бы собственным значением у. Ш. Этого не может быть, так как всякий физический потенциал является действительным и все собственные значения энергии действительны.

Таким образом, требование действительности потенциала приводит к тому, что все полюса функции $S_l(k)$ в верхней полуплоскости лежат на мнимой оси. В нижней полуплоскости, однако, никаких ограничений на положение полюсов нет, и они могут быть расположены где угодно. Эти выводы оказываются справедливыми, даже если взаимодействие не является потенциальным. Важно только, чтобы гамильтониан был эрмитов.

Этой теореме можно дать другое, более формальное доказательство. Рассмотрим временно у. Ш. и ему сопряженное:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi, \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + U \psi^*. \end{aligned}$$

Умножим первое уравнение на ψ^* , второе — на ψ и вычтем одно из другого. Получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*).$$

Проинтегрируем обе стороны по произвольному объему V , заключенному внутри поверхности S . В результате придем к закону сохранения числа частиц

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dr = \oint_S dS \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (1.11)$$

Пусть теперь $S(k)$ имеет полюс в какой-то точке $k_0 = k_1 + ik_2$. Волновая функция в этой точке будет иметь вид

$$\psi = \frac{1}{r} \chi(r) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \sim \frac{1}{r} e^{i(k_1 + ik_2)r - \frac{i\hbar}{2m}(k_1^2 - k_2^2 + 2ik_1 k_2)t}.$$

Подставим это выражение в (1.11), выбрав в качестве объема V внутренность сферы $r = R$, причем R будем предполагать большим, так что на поверхности сферы можно пользоваться асимптотическим выражением для волновой функции. Элементарные выкладки дают

$$k_1 k_2 \int_0^R |\chi(r)|^2 dr = -\frac{k_1}{2R^2} e^{-2Rk_2}.$$

Так как справа стоит знак минус, то это равенство выполняется, лишь если

- а) $k_1 = 0$, т. е. полюс $S(k)$ лежит на мнимой оси.
- б) $k_1 \neq 0$, $k_2 < 0$, т. е. полюс $S(k)$ находится в нижней полуплоскости.

Таким образом, теорема доказана.

Единственное условие на положение полюсов в нижней полуплоскости заключается в том, что они должны быть расположены парами симметрично относительно мнимой оси*). Нули $S_l(k)$ в нижней полуплоскости, однако, могут располагаться только на мнимой оси. Это следует из (1.5).

*) Для потенциалов, обращающихся в нуль при $r > R$, число таких полюсов бесконечно (Ж. Умбле, 1952; Х. Рольник, 1956; Т. Редже, 1958); при этом распределение далеких полюсов полностью определяется поведением потенциала при $r \rightarrow R$. В случае прямоугольной ямы распределение полюсов детально изучено в работе Х. Нуссенцвейга (1959).

Полюсам в верхней полуплоскости соответствуют, как правило, связанные состояния частиц в поле $U(r)$. В полюсах, расположенных в нижней полуплоскости, регулярная в нуле волновая функция имеет асимптотический вид

$$\left. \begin{aligned} \chi_{kl}(r) &\sim -(-i)^l e^{ikr} = -(-i)^l e^{ir \operatorname{Re} k + r |\operatorname{Im} k|}, \\ \chi_{kl}(r) &\rightarrow \infty \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \end{aligned} \right\} \quad (1.12)$$

т. е. расходится на бесконечности.

Таким образом, эта волновая функция не удовлетворяет граничному условию на бесконечности и, следовательно, казалось бы, не может претендовать на физический смысл. Это, однако, не совсем так. Дело в том, что, как будет показано в гл. VII, каждому полюсу $S_l(k)$ в нижней полуплоскости соответствует так называемое квазистационарное состояние частицы в поле потенциала $U(r)$, т. е. такое состояние, которое, раз образовавшись, живет в течение некоторого периода времени t .

Резюмируем теперь наши сведения о топографии функции $S_l(k)$ в комплексной области. Эта функция аналитична во всей плоскости комплексного переменного k , за исключением, может быть, изолированных точек и разрезов. В верхней полуплоскости она может иметь полюса на мнимой оси. Некоторые из них соответствуют связанным состояниям, другие — «ложные». В следующем параграфе будет дан рецепт, как узнавать «ложные» полюса. $S_l(k)$ может иметь нули в верхней полуплоскости и соответствующие им полюса в нижней полуплоскости. На мнимой оси $S_l(k)$ действительна, а на действительной оси ее модуль равен единице. Если вместо волнового вектора k пользоваться энергией, то надо учитывать при этом, что плоскость k отображается на двулистую плоскость энергии E . Связанным состояниям соответствуют полюса на левой полуоси верхней плоскости E . Полюса на нижнем листе плоскости E соответствуют квазистационарным состояниям.

В дальнейшем нам понадобятся свойства симметрии фаз рассеяния. На действительной оси фаза δ действительна. Из (1.5) сразу следует, что для действительных k

$$\delta_l(k) = -\delta_l(-k). \quad (1.13)$$

Нормированные на $\delta(k - k')$ волновые функции имеют асимптотику

$$\chi_{kl} \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(kr + \delta(k) - \frac{\pi l}{2} \right).$$

Пользуясь этим выражением, легко проверить, что при изменении знака k волновые функции ведут себя следующим образом:

$$\chi_{k, l}(r) = (-1)^{l+1} \chi_{-k, l}(r). \quad (1.14)$$

Выше говорилось, что $S_l(k)$ является аналитической функцией в комплексной плоскости k . Это справедливо для любых короткодействующих потенциалов и является следствием физического принципа причинности*). Именно, причина должна предшествовать следствию. Это — обязательное требование любой физической теории, и, как оказывается, это требование ведет к далеко идущим последствиям. Постараемся сейчас хотя бы в грубых чертах понять, к каким формальным следствиям приводит принцип причинности.

Напишем выражение для волновой функции при заданной энергии E на некотором заданном расстоянии $r = a$ вне радиуса действия потенциала:

$$(e^{-ika} - S(E) e^{ika}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}.$$

Первый член соответствует волне, падающей на рассеивающий центр, а второй — расходящейся волне. Построим локализованный в пространстве волновой пакет:

$$\int_0^{\infty} dE' (f(E') e^{-ik'a} - g(E') e^{ik'a}) e^{-\frac{iE't}{\hbar}},$$

$$g(E') = S(E') f(E'). \quad (1.15)$$

*) Эта идея была высказана в работе В. Шютцера, И. Тиомно (1947), однако доказательства, приведенные в ней, не являются вполне строгими. Строгое доказательство, полученное впервые в работе Н. Ван Кампена (1953), требует знания довольно тонких теорем теории аналитических функций.

Очевидно, что волновой пакет, описывающий падающие волны, есть

$$\Phi_{\text{пад}}(a, t) = \int_0^{\infty} dE' f(E') e^{-ik'a - \frac{iE't}{\hbar}},$$

а расходящиеся волны —

$$\Phi_{\text{расх}}(a, t) = \int_0^{\infty} dE' g(E') e^{ik'a - \frac{iE't}{\hbar}}.$$

Так как система линейна и амплитуда расходящихся частиц целиком определяется падающей волной, то между обеими амплитудами должна существовать связь

$$\Phi_{\text{расх}}(a, t) = \int_{-\infty}^{\infty} H(t-t') \Phi_{\text{пад}}(a, t') dt', \quad (1.16)$$

где H — некое ядро преобразования.

И вот здесь-то вступает в игру принцип причинности: амплитуда расходящейся волны в момент времени t может зависеть от $\Phi_{\text{пад}}(t')$, только если $t > t'$. Поэтому обязательно должно выполняться условие

$$H(t-t') = 0 \quad \text{при } t' > t. \quad (1.17)$$

Вводя компоненту Фурье $h(\omega)$ оператора H :

$$H(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} h(\omega), \quad (1.18)$$

легко убеждаемся с помощью (1.15)—(1.18) в том, что

$$h(E) = \frac{1}{2\pi} e^{2ika} S(E). \quad (1.19)$$

Обращая (1.18), получаем

$$e^{2ika} S(E) = + \int_{-\infty}^{\infty} e^{iE\tau} H(\tau) d\tau.$$

В общем случае эта формула ничего не говорит о свойствах $S(E)$. Из принципа причинности, однако, из-

вестно (см. (1.17)), что $H(\tau) = 0$ для $\tau < 0$. Поэтому интегрирование надо начинать с нуля:

$$e^{2ika} S(E) = + \int_0^{\infty} e^{iE\tau} H(\tau) d\tau. \quad (1.20)$$

В этом случае уже очевидно, что стоящая справа функция аналитична в верхней полуплоскости E , так как $e^{iE\tau}$ там экспоненциально затухает. На плоскости k этому соответствует первый квадрант. Отсюда, пользуясь свойствами симметрии $S(k)$, получаем, что $S(k)$ аналитична во всех квадрантах. Смысл экспоненциального множителя e^{2ika} в (1.20) состоит в том, что он учитывает опережение по фазе волны, отраженной от поверхности сферы $r = a$, по сравнению с волной, проходящей через центр рассеивателя (Д. Вонг, Дж. Толл, 1957) (разность длин соответствующих путей равна $2a$).

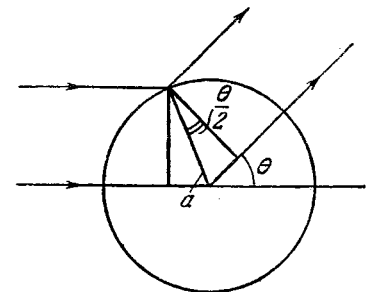


Рис. 9.

В случае рассеяния плоской волны на отличный от нуля угол θ нужно выбрать кратчайший путь (что соответствует максимальному опережению по фазе), проходящий через рассеиватель и приходящий к наблюдателю под углом θ (рис. 9). Нетрудно видеть, что длина этого пути по сравнению с длиной пути, проходящего через центр рассеивателя, меньше на величину $2a \sin \frac{\theta}{2}$. Это приводит к тому, что величиной, аналитичной в верхней полуплоскости E , будет являться не амплитуда рассеяния $f(E, \theta)$, а величина $e^{2ika \sin \frac{\theta}{2}} f(E, \theta)$. Отсюда видно, что наиболее простыми аналитическими свойствами обладает величина $f(E, 0)$ (она аналитична в верхней полуплоскости E).

Принцип причинности можно также использовать для получения свойств аналитичности амплитуды рассеяния по передаваемому импульсу (Х. Нуссенцвейг, 1960).

Заметим, что справедливость сделанных выше утверждений об аналитичности не зависит от конкретного вида потенциала при $r < a$. Более того, даже предположение о том, что волновая функция внутри области взаимодействия (при $r < a$) удовлетворяет у. Ш., является излишним. Иными словами, свойство аналитичности величины $S(E)$ в верхней полуплоскости E является прямым следствием одного лишь принципа причинности. Дискуссию по этому вопросу см. в работах Е. Пауера и И. Сааведры (1961), М. Эбеля (1962).

§ 2. «Ложные» полюса

Выше уже говорилось, что в верхней полуплоскости величина $S_l(k)$ может иметь не только полюса, соответствующие связанным состояниям и расположенные на мнимой полуоси, но и так называемые «ложные» полюса*). Природу «ложных» полюсов легко понять, вспомнив определение $S_l(k)$: выбираются два независимых решения у. Ш. $\chi_{kl}^{(+)}$ и $\chi_{kl}^{(-)}$, имеющие при больших

r асимптотический вид $\chi_{kl}^{(\pm)} \sim e^{\pm i \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right)}$; поскольку при этом имеется в виду задача о рассеянии, то асимптотика вычисляется при действительных положительных k . Затем из этих двух решений конструируется регулярное в нуле решение

$$\chi_{kl}(r) = \chi_{kl}^{(-)} - S_l(k) \chi_{kl}^{(+)}$$

Для того чтобы эта функция обращалась в нуль при $r = 0$, необходимо и достаточно, чтобы $S_l(k)$ имела вид (1.2). Те точки в верхней полуплоскости k , где обращается в нуль знаменатель (1.2) ($\chi_{kl}^{(+)}(0)$), соответствуют связанным состояниям. Эти точки лежат на мнимой полуоси в верхней полуплоскости. Но, кроме полюсов такой природы, $S_l(k)$ может иметь полюса, связанные с полюсами функции $\chi_{kl}^{(-)}(r)$. При этом имеются в виду те точки комплексной k -плоскости, где $\chi_{kl}^{(-)}$ как функция k обращается в бесконечность тождественно, при

*) На существование этих полюсов впервые указал С. Ма (1947).

всех значениях r . Ясно, что таким точкам не соответствуют никакие связанные состояния.

Рассмотрим конкретный пример потенциала $V(r) = -V_0 e^{-\frac{r}{a}}$. У. Ш. в этом случае имеет вид

$$\chi_k''(r) + [k^2 + V_0 e^{-\frac{r}{a}}] \chi_k(r) = 0 \quad (2.1)$$

и после введения новой переменной $y = 2a \sqrt{V_0} e^{-\frac{r}{2a}}$ сводится к уравнению Бесселя

$$\chi_k''(y) + \frac{1}{y} \chi_k'(y) + \left[1 - \frac{(ip)^2}{y^2} \right] \chi_k(y) = 0, \quad (2.2)$$

где $p = 2ka$. В качестве двух независимых решений этого уравнения мы можем взять бесселевы функции $J_{ip}(y)$ и $J_{-ip}(y)$, определяемые, как обычно:

$$J_\nu(y) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \left(\frac{y}{2} \right)^{\nu+2m} \frac{1}{m! \Gamma(m+\nu+1)}. \quad (2.3)$$

С помощью этого разложения легко находим асимптотический вид функций $J_{\pm ip}$ при $r \rightarrow \infty$ (т. е. когда $y \rightarrow 0$)

$$J_{\pm ip}(y) \underset{y \rightarrow 0}{\sim} (\sqrt{a^2 V_0})^{\pm ip} \frac{e^{\mp ikr}}{\Gamma(1 \pm ip)}. \quad (2.4)$$

Таким образом, мы можем определить функции $\chi_k^{(\pm)}(r)$:

$$\left. \begin{aligned} \chi_k^{(\pm)}(r) &= \Gamma(1 \mp ip) (\sqrt{a^2 V_0})^{\pm ip} J_{\mp ip} \left(2a \sqrt{V_0} e^{-\frac{r}{2a}} \right), \\ \chi_k^{(\pm)}(r) &\sim e^{\pm ikr} \text{ при } r \rightarrow \infty. \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

Пользуясь определением (1.2), находим

$$S(k) = \frac{\Gamma(1+ip)}{\Gamma(1-ip)} (\sqrt{a^2 V_0})^{-2ip} \frac{J_{ip}(y_0)}{J_{-ip}(y_0)}, \quad y_0 = 2a \sqrt{V_0}. \quad (2.6)$$

Случаю притяжения соответствует положительное значение V_0 , т. е. аргумент бесселевых функций y_0 — положительное число. При действительных k , согласно определению, $\delta(k)$ также действительно и, очевидно,

$|S(k)| = 1$. На положительной мнимой полуоси $-ip = -i2ak = +2a|k|$ и $S(k)$ имеет полюса в точках k_n , где

$$J_{2|k_n|a}(2a\sqrt{V_0}) = 0. \quad (2.7)$$

Эти полюса, очевидно, соответствуют связанным состояниям, так как волновая функция

$$\chi_k(r) = \frac{1}{S(k)} \chi_k^{(-)} - \chi_k^{(+)} \xrightarrow{k \rightarrow k_n} -\chi_{k_n}^{(+)}(r);$$

$$\chi_{k_n}^{(+)}(r) \sim e^{-|k_n|r}, \quad r \rightarrow \infty; \quad \chi_{k_n}^{(+)}(r) \rightarrow 0, \quad r \rightarrow 0$$

в этих точках удовлетворяет обоим граничным условиям.

Кроме полюсов этого типа, $S(k)$ имеет также полюса в точках

$$1 + ip = 1 - 2a|k_m| = -m \quad (m = 0, 1, 2, 3, 4, \dots),$$

где обращается в бесконечность $\Gamma(1 + ip)$. Эта бесконечная последовательность полюсов не соответствует никаким связанным состояниям, и они, следовательно, «ложные». Чтобы убедиться в этом, напишем выражение для волновой функции. Используя (2.5), получаем

$$\chi_k(r) = (\sqrt{a^2 V_0})^{-ip} \Gamma(1 + ip) \left[J_{ip}(y) - \frac{J_{ip}(y_0) J_{-ip}(y)}{J_{-ip}(y_0)} \right]. \quad (2.8)$$

В точках $k = k_m$ множитель $\Gamma(1 + ip)$ обращается в бесконечность. При этом, однако, выражение, стоящее в квадратных скобках в (2.8), согласно известному свойству бесселевых функций $J_{-l}(y) = (-1)^l J_l(y)$, где l — целое число, обращается в нуль.

Для раскрытия возникающей неопределенности воспользуемся выражением для функций Бесселя с отрицательным индексом

$$J_{-\nu}(y) = \cos \nu J_{\nu}(y) - \sin \nu N_{\nu}(y);$$

здесь $N_{\nu}(y)$ — функция Неймана. С помощью этого тождества без труда получаем

$$\chi_{k_m}(r) = \lim_{k \rightarrow k_m} \chi_k(r) =$$

$$= -\frac{\pi}{m!} (a\sqrt{V_0})^{m+1} \left[N_{m+1}(y) - J_{m+1}(y) \frac{N_{m+1}(y_0)}{J_{m+1}(y_0)} \right]. \quad (2.9)$$

Это решение регулярно в нуле, однако при $r \rightarrow \infty$ экспоненциально растет. $\chi_{k_m}(r) \sim e^{k_m r}$ при $r \rightarrow \infty$ и потому не соответствует никакому связанному состоянию.

Попытаемся теперь разобраться в общих причинах возникновения «ложных» полюсов. Они, как мы уже знаем, связаны с полюсом функции $\chi_k^{(-)}$. Мы определяем функцию $\chi_k^{(-)}$ как такое решение у. Ш., которое при больших r ведет себя на действительной оси k как e^{-ikr} . Но если $\chi_k^{(-)}$ где-то в комплексной области k обращается в бесконечность, то это означает, что асимптотическое выражение $\chi_k^{(-)} \sim e^{-ikr}$ не сохраняется при уходе с действительной оси в комплексную плоскость, так как e^{-ikr} не равно бесконечности ни при каких значениях k , кроме $k = i\infty$. Асимптотический вид функции не сохраняется, если в точном выражении для этой функции, кроме члена e^{-ikr} , содержатся также члены такого типа, что ими можно спокойно пренебречь лишь на действительной оси, но не во всей комплексной плоскости.

В рассмотренном нами случае экспоненциального потенциала эти члены имеют следующий вид:

$$\chi_k^{(-)} = e^{-ikr} \left(1 + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m (a^2 V_0)^m \frac{\Gamma(1 + ip)}{m! \Gamma(m + ip + 1)} e^{-\frac{mr}{a}} \right). \quad (2.10)$$

На действительной оси при достаточно больших r вторым членом в (2.10) всегда можно пренебречь. При переходе в комплексную плоскость положение существенно меняется из-за наличия полюсов у Γ -функции на отрицательной полуоси. В точках полюсов второй член в (2.10) становится доминирующим по сравнению с единицей,

несмотря на малость экспоненциальных членов $e^{-\frac{mr}{a}}$.

Теперь мы уже можем ответить на вопрос о том, когда «ложные» полюса не возникают. Действительно, как это видно из предыдущих рассуждений, достаточным условием отсутствия «ложных» полюсов является справедливость асимптотического поведения $\chi_k^{(-)} \sim e^{-ikr}$ во всей верхней полуплоскости, так как в этом случае $\chi_k^{(-)}$ нигде не имеет полюсов. Отсюда непосредственно следует,

что если потенциал $V(r)$ тождественно равен нулю вне некоего сколь угодно большого радиуса R , то «ложных» полюсов нет*). Дело в том, что в этом случае при $r > R$ функция $\chi_k^{(-)}$ (так же как и $\chi_k^{(+)}$) является суперпозицией бесселевых функций, для которых справедливость асимптотических выражений во всей комплексной плоскости просто доказывается (например, с помощью везде справедливой формулы (2.3)). Таким образом, в рассматриваемом случае $\chi_k^{(-)}$ не имеет полюсов нигде, и, стало быть, «ложных» полюсов нет. Это легко проверить на разобранном выше примере экспоненциального потенциала, обрезав его при каком-то значении радиуса $r = R$. При этом все полюса, соответствующие связанным состояниям, практически остаются на своих местах, а «ложные» полюса пропадают.

Таким образом, мы приходим к примечательному результату: при обрезании потенциала все «ложные» полюса, не имеющие физического смысла, исчезают, тогда как «физические» полюса, соответствующие связанным состояниям, после обрезания остаются практически на своих местах. Последнее понятно. Если мы обрезаем потенциал где-то далеко, где он совсем мал, то это очевидным образом не может привести к изменению физических свойств системы, в частности энергий и волновых функций связанных состояний. Такого рода ситуация, когда обрезание какого-то рода сильно упрощает аналитические свойства функций, не меняя их физического содержания, встречается в современной теоретической физике очень часто. Пример с «ложными» полюсами является, пожалуй, наиболее простым с точки зрения математики.

Приведенные выше соображения позволяют дать следующий общий рецепт вычисления энергий связанных состояний для потенциалов, не обращающихся тождественно в нуль на бесконечности: надо обрезать потенциал на некоем радиусе $r = R$, найти положение полюсов $S_l(k)$ в верхней полуплоскости k и затем устре-

*) Можно показать также (Т. Редже, 1958), что «ложные» полюса отсутствуют в случае потенциалов, убывающих на больших расстояниях быстрее любой экспоненты $e^{-\mu r}$.

мить R к бесконечности; пределы $k_n(R)|_{R \rightarrow \infty}$ и будут определять энергии связанных состояний.

С вопросом о «ложных» полюсах S -матрицы тесно связан вопрос о восстановлении потенциала $U(r)$ по фазе рассеяния $\delta_l(k)$, например по S -фазе $\delta_0(k)$. Оказывается, что, в отличие от случая классической механики, где данные рассеяния полностью определяют потенциал $U(r)$ (Дж. Келлер и др., 1956), решение этой задачи неоднозначно. В. Баргманном (1949) были приведены примеры различных потенциалов и даже семейств потенциалов, дающих одно и то же выражение для фазы рассеяния $\delta_0(k)$. При этом различным потенциалам $U(r)$ соответствуют, вообще говоря, различные подразделения всех полюсов величины $S_0(k) = e^{2i\delta_0(k)}$ на «истинные» и «ложные» полюса. Это свойство, а также другие интересные свойства потенциалов Баргманна, выясняются в работе М. Фаулера (1961) (см. также К. Чадан, 1962). Любопытно, что существуют потенциалы (Х. Мозес, З. Туан, 1959), для которых фаза рассеяния $\delta_0(k) \equiv 0$, т. е. рассеяние в S -состоянии при всех значениях k отсутствует.

Вопрос об определении потенциала по фазам рассеяния был полностью решен в работах И. М. Гельфанда и Б. М. Левитана (1951) и В. А. Марченко (1955), где было показано, что для однозначного восстановления потенциала, помимо фаз рассеяния, необходимо знать также энергии связанных состояний и коэффициенты A_n , определяющие при больших r асимптотику соответствующих волновых функций

$$\psi_n \sim A_n \frac{e^{-\kappa_n r}}{r}.$$

Подробно этот вопрос рассмотрен в обзоре Л. Д. Фаддеева (1959) и книге З. С. Аграновича и В. А. Марченко (1960).

§ 3. Свойства вычетов величины $S_l(k)$

Пусть мы имеем связанное состояние с моментом l и энергией связи

$$-E_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}.$$

Волновую функцию этого состояния будем считать нормированной:

$$\int_0^{\infty} |\chi_l(r)|^2 dr = 1.$$

Рассмотрим сначала тот случай, когда при $r \rightarrow \infty$ потенциал $U(r)$ падает быстрее, чем $1/r$. Тогда χ_l ведет себя при больших r как

$$\chi_l \sim A_l e^{-\kappa r}, \quad (3.1)$$

где A_l — некая постоянная, определяемая видом потенциала.

Как мы знаем, величина $S_l(k)$ имеет полюс в точке $k = i\kappa$:

$$S_l(k) = \frac{C_l}{k - i\kappa}. \quad (3.2)$$

Можно доказать, что существует универсальная связь между C_l — вычетом S_l в полюсе — и постоянной A_l , входящей в асимптотику нормированной волновой функции связанного состояния *):

$$C_l = (-1)^{l+1} i |A_l|^2. \quad (3.3)$$

Эта формула позволяет по поведению фаз рассеяния делать заключения о свойствах связанного состояния. В полевых теориях аналогичные формулы используются для определения констант взаимодействия между частицами.

Перейдем к доказательству соотношения (3.3). Регулярное в нуле решение, имеющее асимптотику

$$\chi_{kl}(r) \sim \text{const} \cdot \left[e^{-i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} - S_l e^{i\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)} \right],$$

должно при $k = i\kappa$ с точностью до постоянного множителя переходить в функцию χ_l связанного состояния.

*) Отметим, что впервые формула (3.3) была получена Х. Крамерсом (1938), а затем независимо в работах В. Гейзенберга (1946) и Х. Меллера (1946); см. также Н. Ху (1948). Обобщение на случай потенциала, не являющегося сферически-симметричным, дано Б. Я. Зельдовичем (1965). Мы вернемся к этому вопросу в § 2 гл. XI.

Нормируем χ_{kl} так, чтобы этот множитель был равен единице:

$$\lim_{k \rightarrow i\kappa} \chi_{kl} = \chi_l.$$

Этому условию, очевидно, отвечает нормировка

$$\chi_{kl} = A_l \left(e^{i\kappa r} - \frac{(-1)^l}{S_l} e^{-i\kappa r} \right). \quad (3.4)$$

Рассмотрим бесконечно малую окрестность полюса:

$$k = i\kappa + \varepsilon, \quad \varepsilon \rightarrow 0, \quad \varepsilon > 0,$$

$$\chi_{kl}(r) = A_l \left(e^{i\kappa r} - \frac{(-1)^l}{C_l} \varepsilon e^{-i\kappa r} \right) \quad (3.4')$$

и воспользуемся законом сохранения числа частиц, который, как нетрудно видеть, справедлив как при действительных, так и при комплексных k :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^R \left| \chi_{kl} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \right|^2 dr = \frac{i\hbar}{2m} \left| e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \right|^2 \left(\chi_{kl}^* \chi'_{kl} - \chi_{kl} \chi_{kl}^* \right) \Big|_{r=R}. \quad (3.5)$$

Рассмотрим сначала левую часть (3.5). Энергия E у нас комплексна:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (i\kappa + \varepsilon)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\kappa^2 - \varepsilon^2) + i \frac{\hbar^2}{m} \kappa \varepsilon,$$

так что мы имеем

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^R \left| \chi_{kl} \right|^2 e^{\frac{2\hbar \kappa \varepsilon t}{m}} dr \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2\hbar}{m} \kappa \varepsilon \left(1 - |A_l|^2 \frac{1}{2\kappa} e^{-2\kappa R} \right). \quad (3.6)$$

Здесь радиус R выбран настолько большим, что можно пользоваться асимптотикой волновой функции (3.1).

Теперь обратимся к правой части (3.5). Вычет C_l , очевидно, есть чисто мнимая величина:

$$C_l^* = -C_l.$$

Это следует из того, что δ_l действительна при мнимых k (см. § 1). Имея это в виду и подставляя (3.4') в правую

часть (3.5), получаем с точностью до линейных по ε членов:

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar}{2m} \left| e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \right|^2 (\chi_{kl}^* \chi'_{kl} - \chi_{kl} \chi_{kl}^*) \Big|_{r=R} \rightarrow \\ \rightarrow \varepsilon \frac{2\hbar\kappa}{m} \left\{ -\frac{i(-1)^l}{C_l} |A_l|^2 - \frac{|A_l|^2}{2\kappa} e^{-2\kappa R} \right\}. \end{aligned}$$

Сравнение этого выражения с (3.6) дает

$$C_l = (-1)^{l+1} i |A_l|^2,$$

что и требовалось доказать.

Соотношение (3.3) можно обобщить и на случай потенциала с кулоновским хвостом (А. М. Переломов и др., 1966Б). $U(r) \sim -\alpha/r$ при $r \rightarrow \infty$. Асимптотика волновой функции в этом случае имеет вид

$$\chi_l(r) \sim A_l (\kappa r)^\eta e^{-\kappa r}, \quad \eta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 \kappa}, \quad (3.1')$$

а соотношение (15.3) переходит в

$$C_{kl} = (-1)^{l+1} i 2^{-2\eta} e^{-i\pi\eta} |A_{kl}|^2. \quad (3.3')$$

Доказанная теорема позволяет установить верхнюю границу для абсолютной величины вычетов C_l . Действительно, пусть относительно потенциала $U(r)$ известно, что он обладает конечным радиусом R ; в этом случае при $r > R$ волновая функция связанного состояния обязана иметь вид функции свободного движения

$$\begin{aligned} \chi_l(r) = A_l k r h_l^{(1)}(kr) = \\ = A_l i^{l+\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{\pi |k_{nl}| r}{2}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(i |k_{nl}| r) \sim A_{nl} e^{-|k_{nl}| r}. \quad (3.7) \end{aligned}$$

Величина нормировочной постоянной A_l зависит, очевидно, от вида потенциала $U(r)$. Перепишем теперь условие нормировки в виде

$$1 = \int_0^\infty |\chi_l(r)|^2 dr = \int_0^R |\chi_l|^2 dr + k^2 \int_R^\infty |A_l|^2 |h_l^{(1)}|^2 r^2 dr. \quad (3.7')$$

В правой части стоят только положительные величины. Поэтому получаем неравенство

$$\begin{aligned} |A_{nl}|^2 \leq \frac{1}{k^2 \int_R^\infty |h_l^{(1)}|^2 r^2 dr} = \\ = \left\{ \frac{\pi k_{nl} (-1)^{l+1}}{4} R^2 \left[-\left(H_{l-\frac{1}{2}}^{(1)}(k_{nl} R) \right)^2 + H_{l-\frac{1}{2}}^{(2)} H_{l+\frac{3}{2}}^{(1)} \right] \right\}^{-1}. \quad (3.8) \end{aligned}$$

В случае $l=0$ и $l=1$ получаем отсюда*), например,

$$|A_0|^2 \leq 2\kappa e^{2\kappa R}, \quad (3.9)$$

$$|A_1|^2 \leq 2\kappa e^{2\kappa R} \frac{1}{1 + \frac{2}{\kappa R}}. \quad (3.9')$$

Таким образом, верхняя граница для $|A_l|^2$ и соответственно C_l определяется значением радиуса потенциала R , энергией связанного состояния и массой частицы m .

В пределе при $R \rightarrow 0$ (3.9) превращается в

$$|A_0|^2 \leq 2\kappa \quad \text{и} \quad |A_1|^2 \leq 0. \quad (3.10)$$

Величина $|A_1|^2$, конечно, не может быть отрицательной. Поэтому полученное выше неравенство означает, что в потенциале, радиус которого $R \rightarrow 0$, невозможно существование связанных состояний с $l \neq 0$. Неравенство для A_0 в рассматриваемом нами случае у. III с точечным потенциалом превращается в равенство, поскольку в этом случае волновая функция связанного состояния имеет вид $Ae^{-\kappa r}$ во всем пространстве и первый член в (3.8) тождественно равен нулю, так что

$$|A_0|^2 = 2|\kappa|.$$

Если радиус R потенциала отличен от нуля, то $|A_0|^2$ строго меньше $2\kappa e^{2\kappa R}$. Этим можно пользоваться, чтобы оценивать радиус потенциала из данных о рассеянии.

*) Эти неравенства были получены в работе М. Рудермана и С. Газиоровича (1958).

В самом деле, хорошо зная фазу рассеяния при действительных k , можно экстраполировать величину $e^{2i\delta}$ в область мнимых k . Тем самым мы найдем вычет C_l и, следовательно, $|A|^2$. Если при этом окажется, что $|A_0|^2 \leq 2|\kappa|$, то потенциал может быть точечным, если же $|A_0|^2 > 2|\kappa|$, то радиус потенциала конечен.

Разберем например, случай взаимодействия между нейтроном и протоном в триплетном состоянии. Для фазы рассеяния в состоянии с нулевым орбитальным моментом оказывается справедливой формула (Л. Д. Ландау, Я. А. Смородинский, 1944)

$$k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2, \quad (3.11)$$

где a — длина рассеяния ($a = 5,4 \cdot 10^{-13}$ см), а так называемый эффективный радиус $r_0 = 2 \cdot 10^{-13}$ см. В рассматриваемом нами случае нейтрон и протон обладают связанным состоянием (дейтон) с энергией связи $\varepsilon = 2,2$ Мэв. С помощью (3.11) легко находим, что вблизи расположенного при $k = k_0 = i|k_0|$ полюса, отвечающего связанному состоянию, имеет место разложение

$$S = e^{2i\delta} \rightarrow -\frac{2i|k_0|}{(k - k_0)(1 - 2r_0/a)^{1/2}}. \quad (3.12)$$

Отсюда находим (см. (3.3)), что нормировочная постоянная волновой функции связанного состояния равна

$$|A|^2 = \frac{2|k_0|}{(1 - 2r_0/a)^{1/2}} \approx \frac{2|k_0|}{1 - r_0|k_0|}, \quad (3.13)$$

а формула (3.9) дает для радиуса взаимодействия R неравенство

$$e^{2|k_0|R} > \frac{1}{1 - r_0|k_0|}. \quad (3.14)$$

Подставляя сюда численные значения $|k_0|$ и r_0 , находим окончательно: $R > 1,35 \cdot 10^{-13}$ см.

Оценку радиуса взаимодействия R можно произвести и другим путем. Для этого заметим, что существует

строгое неравенство *) (мы его докажем несколько дальше)

$$\frac{d\delta}{dk} + R - \frac{1}{2k} \sin(2kR + 2\delta) > 0. \quad (3.15)$$

Подставляя сюда фазу δ из (3.11) и переходя к пределу $k \rightarrow 0$, находим, что (3.15) сводится к

$$R \left[1 - \frac{R}{a} + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a} \right)^2 \right] > \frac{r_0}{2}. \quad (3.16)$$

Докажем теперь (3.15). Напишем у. Ш. для двух близких значений энергии E и E_1 :

$$\chi_E'' - \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) \chi_E = 0, \quad \chi_{E_1}'' - \frac{2m}{\hbar^2} (U - E_1) \chi_{E_1} = 0.$$

Умножим первое из этих уравнений на χ_{E_1} , второе — на χ_E и вычтем одно из другого. Получим

$$(\chi_E \chi_{E_1}' - \chi_E' \chi_{E_1})' = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E) \chi_E \chi_{E_1}.$$

Проинтегрируем обе стороны полученного равенства по r от нуля до R . Переходя затем к пределу при $E_1 \rightarrow E$, находим

$$\int_0^R \chi_E^2 dr = \frac{\hbar^2}{2m} \lim_{E_1 \rightarrow E} \frac{1}{E_1 - E} (\chi_{E_1} \chi_E' - \chi_{E_1}' \chi_E) \Big|_{r=R}. \quad (3.17)$$

Так как при $r = R$ потенциал уже равен нулю, то для волновых функций χ можем использовать выражение

$$\chi_E \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta).$$

Подставляя его в (3.17), после элементарных выкладок найдем (Г. Людерс, 1955)

$$\int_0^R \chi_E^2 dr = \frac{1}{\pi} \left\{ \left(R + \frac{d\delta}{dk} \right) - \frac{1}{2k} \sin 2(kR + \delta) \right\}. \quad (3.18)$$

*) Это неравенство впервые было получено Е. Вигнером (1955), исходя из одного лишь принципа причинности.

В левой части стоит заведомо положительное выражение. Значит, положительна и правая часть, т. е. имеет место неравенство (3.15).

Прежде чем закончить этот параграф, отметим, что полученные выше результаты относятся лишь к случаю у. III с потенциалом. Они требуют видоизменения, если мы имеем дело с системой частиц, способных превращаться друг в друга. Более подробно об этом будет говориться в гл. XI.

§ 4. Дисперсионные соотношения

Сейчас будет рассмотрено несколько примеров, когда общие свойства аналитичности величины $S_l(k)$ позволяют установить полезные соотношения для волновой функции.

Выше уже говорилось, что величины $S_l(k)$ являются аналитическими функциями k , имеющими в верхней полуплоскости полюса лишь на мнимой оси. Часть этих полюсов соответствует связанным состояниям, кроме того, имеются «лишние» полюса. Вблизи n -го полюса

$$S_l(k) = \frac{C_{nl}}{k - k_{nl}} \quad \text{и} \quad \frac{S'_l(k)}{S_l(k)} = 2i\delta'_l(k) = -\frac{1}{k - k_{nl}}. \quad (4.1)$$

Мы знаем, кроме того, что в нижней полуплоскости полюса расположены попарно симметрично относительно мнимой оси и каждой паре соответствует так называемое квазистационарное состояние. Кроме того, могут существовать полюса и на отрицательной мнимой полуоси. Эти полюса соответствуют так называемым виртуальным состояниям. В верхней полуплоскости каждому из этих полюсов соответствует нуль величины $S_l(k)$. Вблизи каждого из нулей

$$S_l(k) = \alpha_{ml}(k - k_{ml}) \quad \text{и} \quad \frac{S'_l(k)}{S_l(k)} = 2i\delta'_l(k) = \frac{1}{k - k_{ml}}. \quad (4.2)$$

Мы рассмотрим сначала случай, когда общее число полюсов S -матрицы конечно. Пусть имеется N_b связанных состояний, N_r «лишних» полюсов, N_q — квазистационарных и N_o — виртуальных состояний. Тогда в верхней

полуплоскости имеется $(N_b + N_r)$ точек, где выполняется (4.1), и $(2N_q + N_o)$ точек, где выполняется (4.2).

Во всех остальных точках $S_l(k)$ конечна. Составим теперь интеграл

$$I = 2i \int_{-\infty}^{\infty} \delta'_l(k) dk = 4i \int_0^{\infty} \delta'_l(k) dk = 4i(\delta_l(\infty) - \delta_l(0)).$$

При $|k| \rightarrow \infty$ $S_l(k) \rightarrow 1 + \frac{2i\beta}{k}$, $\beta = \text{const}$ (см. гл. IV). Это означает, что фаза $\delta_l(k) \rightarrow p\pi + \beta/k$, где p — целое число, а $\delta'_l(k) \sim k^{-2}$. Мы можем поэтому замкнуть контур сверху и сразу же вычислить интеграл, так как в верхней полуплоскости нам известны все полюса и их вычеты:

$$I = 2\pi i(2N_q + N_o - N_b - N_r).$$

Приравнивая оба выражения для I , получаем формулу, связывающую величину фазы на бесконечности с количеством связанных и квазистационарных состояний (мы считаем, что $\delta_l(0) = 0$)

$$\delta_l(\infty) - \delta_l(0) = \delta_l(\infty) = \frac{\pi}{2}(2N_q + N_o - N_b - N_r). \quad (4.3)$$

В общем случае, например, в случае потенциала, обращаясь в нуль при $r > R$, имеется бесконечное число полюсов. Число же связанных состояний в большинстве случаев конечно. Приведенное выше рассуждение при этом уже непригодно, поскольку мы не можем пренебречь интегралом по верхней полуокружности. Тем не менее, и в этом случае, как было показано Н. Левинсоном (1949), удается получить формулу, связывающую величину фазы на бесконечности с числом связанных состояний N_b :

$$\delta_l(\infty) - \delta_l(0) = -\pi N_b. \quad (4.4)$$

Докажем эту важную формулу. Рассмотрим величину

$$D_l(k) = \chi_{kl}^{(+)}(0), \quad D_l^*(k) = (-1)^l D_l(-k). \quad (4.5)$$

Функция $D_l(k)$ аналитична в верхней полуплоскости k ; на мнимой полуоси она имеет нули, соответствующие

связанным состояниям. Как следует из (1.2) и (1.3), величину S_l можно записать в виде

$$S_l(k) = \frac{D_l^*(k)}{D_l(k)} = (-1)^l \frac{D_l(-k)}{D_l(k)}. \quad (4.6)$$

Составим, как и прежде, интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{S_l'(k)}{S_l(k)} dk = 4i(\delta_l(\infty) - \delta_l(0)).$$

Выражая в нем S_l через D_l и замыкая контур сверху, получаем

$$I = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{D'(-k)}{D(-k)} + \frac{D'(k)}{D(k)} \right] dk = -2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D'(k)}{D(k)} dk = -4\pi i N_b.$$

Сравнение двух выражений для I и дает (4.4).

Ясно, что приведенное выше доказательство теоремы Левинсона *) справедливо и в том случае, когда общее число полюсов конечно. Из сравнения (4.3) и (4.4) при этом получаем

$$N_r = N_b + N_v + 2N_q. \quad (4.7)$$

Мы получили, таким образом, любопытный факт: в случае потенциалов, приводящих к конечному числу полюсов в S -матрице, число «лишних» полюсов полностью определяется числом связанных, виртуальных и квазистационарных состояний. Простейший случай $N_b = 1, N_v = N_q = 0$ ($N_v = 1, N_b = N_q = 0$) приводит при этом к одному «лишнему» полюсу и соответствует «приближению эффективного радиуса» (М. Фаулер, 1961; С. Фраучи, 1963) ($k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2$ при $r_0 > 0$).

*) Иной, также довольно простой способ вывода теоремы Левинсона можно найти в работе М. Велнера (1964). Заметим, что эту теорему можно распространить и на более общий класс гамилтонианов (Дж. Яух, 1957). В работах Дж. Полкингхорна (1958); М. Иды (1959) было получено обобщение теоремы Левинсона. И, наконец, Ф. Варнок (1963) доказал эту теорему для релятивистского случая.

Приступим теперь к выводу общих дисперсионных соотношений для $S_l(k)$ *). Мы знаем, что величина $S_a(k) = e^{2ika} S(k)$ аналитична в верхней полуплоскости k .

Рассмотрим интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_a(k)}{(k-z)k} dk, \quad g_a(k) = S_a^{-1}(k), \quad (4.8)$$

где z — некая точка в первом квадранте плоскости k . Замкнув контур сверху и замечая, что интеграл по полуокружности равен нулю, сразу же пишем, что это выражение равно

$$2\pi i \times (\text{сумма вычетов в верхней полуплоскости}) = 2\pi i \left\{ \frac{g_a(z)}{z} + \sum_n \frac{\operatorname{Res} g_a(k)}{(k-z)k} \Big|_{k=k_n} \right\}. \quad (4.9)$$

Здесь первый член соответствует полюсу при $k = z$, а сумма — связанным состояниям. Будем теперь стремиться мнимую часть z к нулю, чтобы z приближалась к точке z_0 на действительной оси (рис. 10). Очевидно, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_a(k) dk}{(k-z)k} = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_a(k) dk}{k(k-z_0)} + \pi i \frac{g_a(z_0)}{z_0},$$

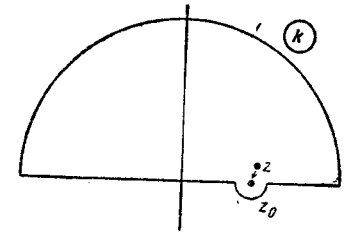


Рис. 10.

где P означает, что интеграл надо понимать в смысле главного значения. Приравнявая это выражение формуле (4.9), где также надо перейти к пределу $z \rightarrow z_0$, получаем окончательно (Н. ван Кампен, 1953)

$$\frac{g_a(z_0)}{z_0} = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_a(k) dk}{(k-z_0)k} - 2 \sum_n \frac{\operatorname{Res} g_a(k_n)}{k_n(k_n-z_0)}.$$

*) Простой вывод дисперсионных соотношений был дан Л. Д. Фаддеевым (1958).

С помощью (3.3) мы можем это так называемое дисперсионное соотношение для $g_a(z_0)$ переписать как

$$\frac{g_a(z_0)}{z_0} = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_a(k)}{(k-z_0)k} dk - 2i \sum_n \frac{(-1)^{l+1} e^{-2|k_n|a} |A_n|^2}{k_n(k_n-z_0)}, \quad (4.10)$$

где A_n — коэффициент перед $e^{-|k_n|r}$ в нормированной волновой функции связанного состояния. Суммирование, как это ясно из вывода, должно быть распространено на все связанные состояния, существующие при рассматриваемом значении орбитального момента.

После того как получена формула (4.10), уже не представляет труда написать аналогичное дисперсионное соотношение для величины $f_a(k, \theta) = e^{2ika \sin \frac{\theta}{2}} f(k, \theta)$, где f — амплитуда рассеяния

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l(k) - 1) P_l(\cos \theta).$$

Дисперсионное соотношение имеет вид

$$f_a(k, \theta) = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_a(k', \theta)}{k' - k} dk' - \sum_{n, l} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{(-1)^{l+1} |A_{nl}|^2 e^{-2|k_{nl}|a \sin \frac{\theta}{2}}}{k_{nl}(k_{nl} - k)}. \quad (4.11)$$

Здесь суммирование во втором члене проводится по всем связанным состояниям системы: по всем значениям орбитального момента l , для которых есть связанные состояния, и по всем состояниям (индекс n) при фиксированном l .

Написанная выше формула может быть переписана в несколько другом виде, если учесть соотношение

$$f_a(-k, \theta) = f_a^*(k, \theta).$$

Тогда (4.7) можно записать так:

$$f_a(k, \theta) = \frac{1}{\pi i} P \int_0^{\infty} dk' \left[\frac{f_a(k', \theta)}{k' - k} - \frac{f_a^*(k', \theta)}{k' + k} \right] - \sum_{nl} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{|A_{nl}|^2 (-1)^{l+1} e^{-2|k_{nl}|a \sin \frac{\theta}{2}}}{k_{nl}(k_{nl} - k)}. \quad (4.12)$$

Преимуществом такой формы записи является то, что интегрирование здесь распространено только на имеющие физический смысл положительные значения волнового вектора.

Дисперсионные соотношения, следующие из аналитичности величин $S_l(k)$ в верхней полуплоскости, накладывают довольно жесткие ограничения на энергетическую зависимость этих величин, а также на энергетическую зависимость амплитуды рассеяния. В частности, они позволяют, как это видно из (4.12), восстановить действительную (мнимую) часть величины f_a , если полностью известны мнимая (действительная) часть ее и положение, а также коэффициенты A_{nl} всех связанных состояний. В этой связи особый интерес представляет дисперсионное соотношение для нулевого угла $\theta = 0$, так как при этом пропадает зависимость от радиуса взаимодействия, и оно позволяет выразить амплитуду $f(k, 0)$ исключительно через наблюдаемые на опыте величины. Для того чтобы увидеть это, вспомним так называемую «оптическую теорему»

$$\text{Im} f(k, 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma(k),$$

где $\sigma(k)$ — полное сечение. С помощью оптической теоремы и дисперсионного соотношения (4.12) для угла $\theta = 0$ действительную часть $f(k, 0)$ можно записать в виде

$$\text{Re} f(k, 0) = \frac{1}{2\pi^2} P \int_0^{\infty} dk' \frac{k'^2 \sigma(k')}{k'^2 - k^2} - \text{Re} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{(-1)^{l+1} |A_{nl}|^2}{k_{nl}(k_{nl} - k)}. \quad (4.13)$$

Эта формула позволяет выразить амплитуду $f(k, 0)$ через непосредственно наблюдаемые на опыте величины

$$f(k, 0) = \operatorname{Re} f(k, 0) + i \frac{k}{4\pi} \sigma(k), \quad (4.14)$$

где действительная часть определяется согласно (4.13).

Соотношения (4.10)–(4.14) выведены нами для простейшего случая потенциального рассеяния. Однако аналогичные соотношения можно получить и при гораздо более общих предположениях о характере взаимодействия частиц друг с другом. Дисперсионные соотношения находят себе массу применений; например, одной из важнейших задач ядерной физики и физики элементарных частиц является определение из опыта фаз рассеяния, так как они позволяют делать важные заключения о характере взаимодействия частиц. Но фазовый анализ (т. е. определение фаз $\delta_l(k)$ из экспериментальных данных о сечениях при этом же значении k) неоднозначен. Это особенно просто видеть в простейшем случае бесспиновых частиц: сечение $\sigma(\theta, k)$, как нетрудно проверить, не меняется при изменении знака всех фаз. Это означает, что если найден один набор фаз, при котором сечение $\sigma(\theta, k)$ совпадает с экспериментальным, то такое же хорошее согласие с опытом получится при изменении знака всех фаз. Никакого способа определить истинный знак фаз $\delta_l(k)$ из величины $\sigma(\theta, k)$ при этой же энергии нет. Эту неоднозначность можно разрешить при помощи дисперсионного соотношения (4.13), которое сразу определяет $f(k, 0)$, а следовательно, и истинный знак фаз, если известно полное сечение $\sigma(k)$ при всех k , а также параметры связанных состояний.

В заключение заметим, что при выводе дисперсионных соотношений использовались лишь свойства аналитичности величин $S_l(k)$ в верхней полуплоскости. Ничего не требовалось знать о поле, действующем на частицу. Это не случайность. Дело в том, что вне зависимости от конкретных потенциалов всякая физическая теория должна удовлетворять принципу причинности. Это приводит, как было показано в § 1, к аналитичности $S_l(k)$

в верхней полуплоскости, что и обеспечивает существование дисперсионных соотношений *).

При выводе дисперсионных соотношений всегда встает вопрос о сходимости интегралов на верхнем пределе. Например, входящий в (4.13) интеграл сходится лишь тогда, когда полное сечение при больших k убывает быстрее чем $1/k$, а это не всегда так. Поэтому обычно рассматривают дисперсионные соотношения не непосредственно для амплитуды рассеяния, а для более быстро сходящихся величин. В качестве последних можно, например, взять частное $\frac{f(k, \theta)}{(k + \alpha)^n}$ или же разность $f(k, \theta) - f_B(k, \theta)$, где $f_B(k, \theta)$ — амплитуда, вычисленная в борновском приближении. Из формул следующей главы будет видно, что это приближение хорошо работает при $k \rightarrow \infty$, так что написанная выше разность быстро сходится при больших k .

*) Этому вопросу посвящен ряд статей (Н. ван Кампен, 1953; Д. Вонг, Дж. Толл, 1957; Х. Нуссенцвейг, 1960).

ГЛАВА IV

ФУНКЦИЯ ГРИНА И ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

§ 1. Введение. Функция Грина радиального уравнения Шредингера

До сих пор мы имели дело с однородным у. Ш. В ряде задач, однако, возникает необходимость решения неоднородного у. Ш. К неоднородным уравнениям сводятся два очень важных класса задач.

Во-первых, это задачи теории возмущений, когда ищутся поправки к волновой функции, возникающие из-за малых возмущений гамильтониана системы. При этом неоднородный член в у. Ш. пропорционален невозмущенной волновой функции. Во-вторых, это задачи, связанные с реакциями, т. е. с рождением частиц. Неоднородность в таких задачах играет роль источника (или стока) новых частиц.

Для работы с неоднородными уравнениями имеется хорошо разработанный аппарат функций Грина. Следует отметить, что этот аппарат применяется и при решении уравнений гораздо более сложных, нежели у. Ш. (например, уравнений квантовой теории поля), и в настоящее время широко используется почти во всех разделах теоретической физики.

Мы ограничимся здесь рассмотрением функций Грина у. Ш. Простейшей из них является функция Грина радиального у. Ш., изучению которой посвящен данный параграф. В следующих двух параграфах рассмотрены некоторые свойства функции Грина трехмерного у. Ш. В § 4 приводится выражение для функции Грина нескольких свободных частиц. Затем мы переходим к рассмотрению теории возмущений. В §§ 5 и 10 разбирается

вопрос о применении теории возмущений в координатном и импульсном представлении.

В следующем параграфе приведены простые примеры, показывающие, что в некоторых случаях теория возмущений неприменима, а в некоторых случаях необходимо суммировать весь ряд теории возмущений.

В заключительном параграфе этой главы изучаются свойства временной функции Грина.

Перейдем теперь к рассмотрению неоднородного у. Ш.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U - E\right)\psi = -\frac{Q}{r}. \quad (1.1)$$

Здесь Q — некая функция, называемая функцией источника или просто источником. На волновую функцию ψ этого уравнения накладываются обычные условия однозначности и конечности.

Для функции, удовлетворяющей (1.1), плотность вероятности, вообще говоря, уже не является сохраняющейся величиной. Действительно, напишем эквивалентное (1.1) временное уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi + \frac{Q}{r} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (1.1')$$

Обычным способом получаем отсюда, что

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_S d\mathbf{S} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \int_V \left(\frac{Q}{r} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi^* - \frac{Q^*}{r} e^{\frac{iEt}{\hbar}} \psi \right) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Отделяя время: $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$, получаем, что даже в стационарном случае поток через сферу большого радиуса отличен от нуля:

$$\int_S \mathbf{j} d\mathbf{S} = \frac{i}{\hbar} \int_V \left(\frac{Q^*}{r} \psi(\mathbf{r}) - \frac{Q}{r} \psi^*(\mathbf{r}) \right) d\mathbf{r}. \quad (1.1'')$$

Таким образом, Q играет роль «поставщика» или «поглотителя» частиц.

Для решения уравнения (1.1) используем аппарат функций Грина. Функцией Грина (ф. Г.) уравнения

$$L_r \chi_k(r) \equiv \left[\frac{d^2}{dr^2} + (k^2 - V(r)) \right] \chi_k(r) = 0, \quad (1.2)$$

по определению, называется симметричная функция двух переменных $G_k(r, r')$, удовлетворяющая уравнению

$$L_r G_k(r, r') = \delta(r - r'). \quad (1.3)$$

Полезность введения такой функции очевидна. В самом деле, с ее помощью общее решение неоднородного уравнения $L_r \varphi = Q$ легко записать в виде

$$\varphi_k(r) = \chi_k(r) + \int_0^\infty dr' G_k(r, r') Q(r'), \quad (1.4)$$

где $\chi_k(r)$ — общее решение однородного уравнения (1.2). Проверить то, что φ действительно является решением неоднородного уравнения, очень просто:

$$L_r \varphi = L_r \chi + \int_0^\infty dr' Q(r') L_r G_k(r, r') = \int_0^\infty dr' Q(r') \delta(r - r') = Q.$$

По известной теореме, гласящей, что общее решение неоднородного уравнения можно представить в виде суммы общего решения однородного уравнения и произвольного частного решения неоднородного уравнения, заключаем, что (1.4) является общим решением неоднородного уравнения, если под χ_k понимать общее решение однородного уравнения (1.2), удовлетворяющее граничным условиям.

Найдем ф. Г. однородного уравнения (1.2). В нашем случае это можно сделать просто. Пусть $r \neq r'$, так что

$$L_r G(r, r') = L_{r'} G(r, r') = 0.$$

Так как ф. Г. симметрична относительно своих аргументов, то она, очевидно, имеет вид

$$G_k(r, r') = \begin{cases} \chi_k^{(1)}(r) \chi_k^{(2)}(r') & \text{при } r > r', \\ \chi_k^{(2)}(r) \chi_k^{(1)}(r') & \text{при } r < r', \end{cases} \quad (1.5)$$

где $\chi_k^{(1)}$ и $\chi_k^{(2)}$ — какие-то два решения однородного уравнения. При $r = r'$ должно выполняться (1.3). Это накладывает определенные ограничения на выбор функций $\chi_k^{(1)}$ и $\chi_k^{(2)}$. Действительно, условие (1.3) подразумевает, что

$$\int_{r-\Delta}^{r+\Delta} dr' L_r G_k(r, r') = 1 \quad (1.6)$$

при любом сколь угодно малом Δ . Вычислим этот интеграл. Если $\chi_k^{(1)} \neq \chi_k^{(2)}$, то функция (1.5) конечна и непрерывна, но имеет разрыв производной при $r = r'$. Это означает, что величина $(k^2 - V) G_k$ конечна и при интегрировании по бесконечно малой области вокруг r соответствующий член в (1.6) дает нуль. Таким образом, соотношение (1.6) можно переписать в виде

$$\int_{r-\Delta}^{r+\Delta} dr' \frac{d^2}{dr'^2} G_k(r, r') = 1. \quad (1.6')$$

Вычислим первую производную

$$\frac{d}{dr} G_k(r, r') = \begin{cases} \chi_k^{(1)'}(r) \chi_k^{(2)}(r') \rightarrow \chi_k^{(1)'}(r) \chi_k^{(2)}(r), & r > r' \\ \chi_k^{(2)'}(r) \chi_k^{(1)}(r') \rightarrow \chi_k^{(1)}(r) \chi_k^{(2)'}(r), & r < r' \end{cases} \quad (1.7)$$

Она имеет разрыв в точке $r = r'$, т. е. является ступенчатой функцией. Поэтому вторая производная $\frac{d^2}{dr^2} G_k(r, r')$ обращается в бесконечность при $r = r'$. Интеграл (1.6), очевидно, равен

$$\int_{r-\Delta}^{r+\Delta} dr' \frac{d^2}{dr'^2} G_k(r, r') = \chi_k^{(1)'}(r) \chi_k^{(2)}(r) - \chi_k^{(1)}(r) \chi_k^{(2)'}(r).$$

Таким образом, функция (1.5) является ф. Г., если

$$\chi_k^{(1)'}(r) \chi_k^{(2)}(r) - \chi_k^{(1)}(r) \chi_k^{(2)'}(r) = 1, \quad (1.8)$$

Этому условию удовлетворяют две пары решений, имеющих асимптотический вид *)

$$\chi_k^{(1)} \sim -e^{\pm i(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)}, \quad \chi_k^{(2)} \sim \frac{1}{k} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right). \quad (1.9)$$

Подставляя эти функции во вронскиан (1.8), легко убедиться в том, что он равен единице на бесконечности, где справедливы выписанные асимптотические выражения. Так как вронскиан не зависит от r , то (1.8) справедливо при всех r .

Итак, две ф. Г. однородного уравнения имеют вид

$$G_{kl}^{(\pm)}(r, r') = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k} \chi_{kl}^{(\pm)}(r_>) \chi_{kl}(r_<), \quad (1.10)$$

где $r_>$ и $r_<$ — это соответственно большее и меньшее из r и r' , а функции $\chi_{kl}^{(\pm)}$ и χ_{kl} определены своими асимптотическими выражениями

$$\chi_{kl}^{(\pm)}(r) \sim e^{\pm i(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)}; \quad \chi_{kl}(r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right).$$

Соответственно двум ф. Г. имеем два независимых решения неоднородного уравнения

$$\begin{aligned} \varphi_{kl}^{(\pm)} = & \int_0^\infty dr' G_{kl}^{(\pm)}(r, r') Q(r') = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k} \times \\ & \times \left\{ \chi_{kl}^{(\pm)}(r) \int_0^r dr' \chi_{kl}(r') Q(r') + \chi_{kl}(r) \int_r^\infty dr' \chi_{kl}^{(\pm)}(r') Q(r') \right\}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Прежде всего, прямой подстановкой легко убедиться, что эти функции действительно являются решениями неоднородного уравнения. Так как χ_{kl} и $\chi_{kl}^{(\pm)}$ ведут себя при $r \rightarrow 0$ как r^{l+1} и r^{-l} соответственно, то $\varphi_{kl}^{(\pm)}$ регулярны в нуле, если $Q(r)$ при $r \rightarrow 0$ возрастает не быстрее

*) Мы считаем при этом, что потенциал $V(r) = V_0(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}$.

чем $1/r^2$. На бесконечности второй член в (1.11) стремится к нулю (если, как это почти всегда бывает, $Q(r)$ достаточно быстро спадает с увеличением r) и $\varphi_{kl}^{(\pm)}$ имеет вид расходящейся или сходящейся волны:

$$\varphi_{kl}^{(\pm)}(r) \sim -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k} e^{\pm i(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)} \int_0^\infty dr \chi_{kl}(r') Q(r'). \quad (1.12)$$

Заметим тут же, что, кроме $G_{kl}^{(\pm)}$, можно построить и ряд других ф. Г. Их, однако, мы не рассматриваем, так как они либо являются линейными комбинациями функций $G^{(\pm)}$, либо генерируют решения неоднородного уравнения, не удовлетворяющие граничному условию при $r \rightarrow 0$.

Наиболее общее решение неоднородного уравнения можно теперь записать так:

$$\beta \chi_{kl}(r) + \alpha \varphi_{kl}^{(+)}(r) + (1 - \alpha) \varphi_{kl}^{(-)}(r), \quad (1.13)$$

где α и β — произвольные постоянные. Амплитуды сходящихся и расходящихся потоков, вообще говоря, не равны друг другу из-за присутствия второго и третьего членов. Другими словами, неоднородность Q в у. Ш. соответствует, как уже отмечалось выше, введению в физическую задачу механизма, ответственного за поглощение или испускание частиц. При этом следует особо отметить, что при заданном источнике Q вероятность рождения (или поглощения) может меняться в значительных пределах. Она целиком определяется граничными условиями на бесконечности, т. е. значениями постоянных α и β .

При отрицательных энергиях обычное у. Ш., как мы знаем, может иметь решения, удовлетворяющие граничным условиям, лишь при некоторых дискретных значениях энергии. В случае неоднородного у. Ш. положение меняется: при любом значении энергии E мы имеем всюду конечное и обращающееся в нуль при $r \rightarrow 0$ решение $\varphi_{kl}^{(+)}$. То, что это решение регулярно в нуле, доказано в абзаце, следующем за формулой (1.11). Регулярность $\varphi_{kl}^{(+)}$ на бесконечности следует из (1.12), куда надо подставить $k = i|k|$. Отметим тут же, что поток частиц

при отрицательных энергиях тождественно равен нулю, так как волновая функция ($\varphi^{(+)} \sim e^{-|k|r}$) в этом случае описывает частицы, локализованные в области вокруг источника; на бесконечность частицы не могут уйти из-за недостатка энергии. Однако при E , равном собственному значению однородного уравнения, решение $\varphi^{(+)}$ не существует, если только Q не ортогонально волновой функции связанного состояния.

Действительно, пусть E_n — энергия связанного состояния, а φ и φ_n — решения неоднородного и однородного уравнений соответственно:

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - U)\varphi = Q, \quad \varphi_n'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - U)\varphi_n = 0.$$

Умножаем первое уравнение на φ_n , второе на φ , вычитаем одно из другого и затем интегрируем обе части полученного равенства по r от нуля до R . При этом, учитывая регулярность обоих решений при $r \rightarrow 0$, получаем

$$\varphi' \varphi_n - \varphi \varphi_n' \Big|_{r=R} = \int_0^R Q(r') \varphi_n(r') dr'.$$

При $R \rightarrow \infty$ решение φ должно оставаться конечным, а φ_n — экспоненциально убывать; левая часть поэтому обращается в нуль при $R \rightarrow \infty$. Таким образом, если φ существует, то мы с неизбежностью приходим к условию

$$\int_0^{\infty} dr' Q(r') \varphi_n(r') = 0. \quad (1.14)$$

§ 2. Регулярный метод получения функций Грина

В предыдущем параграфе мы нашли выражение для ф. Г. радиального у. Ш. При этом был использован кустарный метод. В более сложных случаях кустарные методы очень громоздки и удобнее пользоваться общим алгоритмом построения ф. Г.

Идея очень проста. Пусть имеется дифференциальный оператор L . Собственные функции φ_e , удовлетво-

ряющие граничным условиям, образуют полную систему функций:

$$L_x \varphi_e(x) = e \varphi_e(x), \quad \sum_e \varphi_e(x) \varphi_e^*(x') = \delta(x - x'). \quad (2.1)$$

Построим функцию

$$G(x, x') = \sum_e \frac{\varphi_e(x) \varphi_e^*(x')}{e}, \quad (2.2)$$

которая, очевидно, и есть ф. Г., так как согласно (2.1),

$$L_x G(x, x') = \sum_e \frac{L_x \varphi_e(x) \varphi_e^*(x')}{e} = \sum_e \varphi_e(x) \varphi_e^*(x') = \delta(x - x').$$

Проиллюстрируем этот метод на примере трехмерного у. Ш.

$$H \psi_E \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \psi_E(r) = E \psi_E(r). \quad (2.3)$$

Полный ортонормированный набор решений этого уравнения, как было показано в гл. II, состоит из функций дискретного и непрерывного спектров:

$$\psi_{nlm}(r) = \frac{\chi_{nl}(r)}{r} Y_{lm} \left(\frac{r}{r} \right), \quad \psi_k^{(+)}(r). \quad (2.3')$$

Построим ф. Г. уравнения

$$(H - E_0) \psi_{E_0}(r) \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U - E_0 \right) \psi_{E_0}(r) = 0, \quad (2.4)$$

где E_0 — некая фиксированная энергия $E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$.

Согласно общему рецепту строим полный набор собственных функций оператора $H - E_0$. При этом исходим из того, что функции (2.3') составляют полный набор решений этого уравнения:

$$(H - E_0) \psi_E = (E - E_0) \psi_E.$$

Далее пишем:

$$G_{E_0}^{(\pm)}(r, r') = -\frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \sum_{nlm} \frac{\psi_{nlm}(r) \psi_{nlm}^*(r')}{k_0^2 - k_{nl}^2} + \int dk \frac{\psi_k^{(+)}(r) \psi_k^{(+)*}(r')}{k_0^2 - k^2 \pm i\gamma} \right\}, \quad (2.5)$$

где γ — бесконечно малая положительная величина, смысл которой выяснится ниже, а суммирование ведется по всем связанным состояниям. Подставляя сюда явные выражения для $\psi_k^{(+)}$ и интегрируя по углам, получаем для второго члена в фигурных скобках

$$\sum_{lm} Y_{lm}\left(\frac{r}{r}\right) Y_{lm}^*\left(\frac{r'}{r'}\right) Q_{kol}^{(\pm)}(r, r') \frac{1}{rr'}, \quad (2.6)$$

где

$$Q_{kol}^{(\pm)}(r, r') = \int_0^\infty dk \frac{\chi_{kl}(r) \chi_{kl}^*(r')}{k_0^2 - k^2 \pm i\gamma}. \quad (2.7)$$

Если r и r' настолько велики, что вместо χ можно подставлять их асимптотические выражения, то интеграл (2.7) легко вычисляется:

$$Q_{kol}^{(\pm)}(r, r') = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{k_0^2 - k^2 \pm i\gamma} \{(-1)^l S_l(k) e^{ik(r+r')} - e^{ik(r-r')}\}.$$

Подынтегральное выражение экспоненциально мало в верхней полуплоскости k (при $r > r'$), поэтому можно

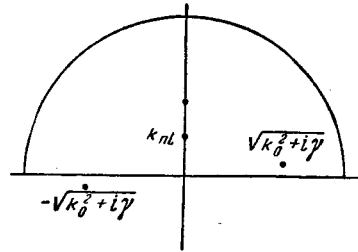


Рис. 11.

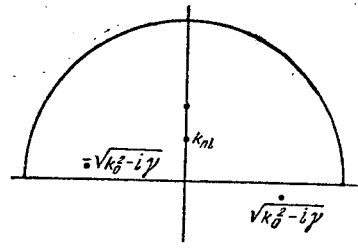


Рис. 12.

замкнуть контур интегрирования, как это показано на рис. 11 и 12. Величина интеграла целиком определяется полюсами подынтегрального выражения в верхней полуплоскости k . Это — полюса величины $S(k)$ при $k = k_{nl}$, отвечающие связанным состояниям, и полюс знаменателя при $k = \pm \sqrt{k_0^2 \pm i\gamma}$.

В случае $Q^{(+)}$ полюса знаменателя расположены, как показано на рис. 11, а полюса $S(k)$ лежат на мнимой оси, так что при $r > r'$ интеграл равен

$$Q_{kol}^{(+)}(r, r') = -\frac{2\pi i}{2\pi} \left\{ (-1)^l \sum_n \frac{e^{-|k_{nl}|(r+r')}}{k_0^2 - k_n^2} \text{Res } S_l(k) |_{k=k_n} - \frac{1}{2k_0} [(-1)^l S_l(k_0) e^{ik_0(r+r')} - e^{ik_0(r-r')}] \right\}. \quad (2.8)$$

Отсюда находим вид $G_{E_0}^{(+)}(r, r')$ для достаточно больших r и r' :

$$G_{E_0}^{(+)}(r, r') = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{lm} Y_{lm}\left(\frac{r}{r}\right) Y_{lm}^*\left(\frac{r'}{r'}\right) \frac{1}{rr'} \times \left(-\frac{1}{k_0} e^{i(k_0 r > - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)} \sin(k_0 r < - \frac{\pi l}{2} + \delta_l) \right). \quad (2.9)$$

Первый член в (2.8) сократился с первым членом в (2.5) благодаря связи между вычетом $S(k)$ и нормировочной постоянной функции связанного состояния (см. § 3 гл. III).

Из предыдущего параграфа известно, что гриновская функция радиального у.Ш. при больших r и r' равна

$$G_{kl}^{(+)}(r, r') = -\frac{1}{k} e^{i(kr > - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)} \sin(kr < - \frac{\pi l}{2} + \delta_l).$$

Поэтому (2.9) можно переписать так:

$$G_{E_0}^{(+)}(r, r') = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{lm} \frac{1}{rr'} G_{kol}^{(+)}(r, r') Y_{lm}\left(\frac{r}{r}\right) Y_{lm}^*\left(\frac{r'}{r'}\right). \quad (2.10)$$

Нетрудно проверить, что эта формула для ф.Г. оказывается справедливой при всех значениях r и r' , если для $G_{kol}^{(\pm)}(r, r')$ пользоваться точной формулой (1.10). В самом деле, подставляя (2.10) в у.Ш., получаем

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{r^2} + V - k_0^2 \right] G_{E_0}^{(+)}(r, r') = \\ = -\sum_{lm} Y_{lm}\left(\frac{r}{r}\right) Y_{lm}^*\left(\frac{r'}{r'}\right) \frac{1}{rr'} \left[-\frac{d^2}{dr^2} + V + \frac{l(l+1)}{r^2} - k_0^2 \right] \times \\ \times G_{kol}^{(+)}(r, r') = \sum_{lm} Y_{lm}\left(\frac{r}{r}\right) Y_{lm}^*\left(\frac{r'}{r'}\right) \frac{1}{r^2} \delta(r-r') = \delta(r-r'). \end{aligned}$$

Здесь \hat{L}^2 — оператор квадрата орбитального момента:

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}.$$

Кроме того, было использовано очевидное равенство, следующее из свойства полноты сферических функций Y_{lm} :

$$\sum_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta', \varphi') = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi'),$$

где $\theta, \theta', \varphi, \varphi'$ — полярные и азимутальные углы векторов $\frac{r}{r}, \frac{r'}{r'}$.

В случае, когда в знаменателе (2.5) перед γ стоит знак минус, положение полюсов подынтегрального выражения показано на рис. 12.

Рассмотрение, полностью аналогичное проведенному выше, дает

$$G_{E_0}^{(-)}(r, r') = - \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{lm} \frac{1}{rr'} G_{k_0 l}^{(-)}(r, r') Y_{lm} \left(\frac{r}{r} \right) Y_{lm}^* \left(\frac{r'}{r'} \right). \quad (2.11)$$

Очевидно, что

$$G_{E_0}^{(-)} = G_{E_0}^{(+)*}. \quad (2.5')$$

Это, впрочем, видно и из общей формулы (2.5).

С помощью (2.10), (2.11) общее решение неоднородного у. III.

$$\left(- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U - E_0 \right) \psi(r) = Q(r)$$

записывается как

$$\psi^{(\pm)}(r) = \psi_{E_0}(r) + \int dr' G_{E_0}^{(\pm)}(r, r') Q(r'), \quad (2.12)$$

где $\psi_{E_0}(r)$ — общее решение однородного уравнения.

При больших r гриновскую функцию можно записать в виде

$$G_{E_0}^{(\pm)}(r, r') \sim \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k_0} \sum_{lm} Y_{lm} \left(\frac{r}{r} \right) Y_{lm}^* \left(\frac{r'}{r'} \right) \frac{1}{rr'} \times \\ \times e^{\pm i(k_0 r - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)} \chi_{k_0 l}(r') = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{\pm i k_0 r}}{r} \psi_{\pm k_0}^{(\mp)*} \left(\frac{r'}{r} \right). \quad (2.13)$$

При выводе использовались известные свойства сферических гармоник и определение ортонормированных функций непрерывного спектра $\psi_k^{(\pm)}(r)$ (см. §§ 2, 3 гл. II).

Из (2.13) следует, что решение неоднородного уравнения асимптотически ведет себя как

$$\psi^{(\pm)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \psi_{E_0}(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{\pm i k_0 r}}{r} \int dr' Q(r') \psi_{\pm k_0}^{(\mp)*} \left(\frac{r'}{r} \right), \quad (2.14)$$

т. е. неоднородность приводит к появлению сходящихся или расходящихся потоков частиц, так что, так же как и в случае радиального уравнения, она играет роль источника (или стока) частиц.

Теперь становится понятным смысл введенной в начале этого параграфа бесконечно малой постоянной γ . Если она входит в (2.5) со знаком плюс, то мы получаем функцию $G^{(+)}$, генерирующую решения типа расходящихся волн. Если перед γ стоит знак минус, то получается комплексно сопряженная функция $G^{(-)}$, дающая решение типа сходящихся волн.

В некоторых особо простых случаях для ф. Г. можно дать замкнутые выражения. В случае свободной частицы, например ($U = 0$), ф. Г. есть

$$G_E^{(\pm)}(r, r') = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|r-r'|}}{|r-r'|}. \quad (2.15)$$

В случае кулоновского потенциала $V = -\alpha/r$ явный вид ф. Г. был найден в работе Л. Хостлера (1964). Довольно простой способ получения этой функции Грина содержится в работе Л. Хостлера и Р. Пратта (1963). Мы приведем лишь окончательную формулу

$$G_E^{(c)(\pm)}(r, r') = G_{E \pm i\gamma}^{(c)}(r, r') = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\Gamma(1-i\eta)}{4\pi|r-r'|} \times \\ \times \frac{1}{ik} \left(- \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \right) W_{i\eta, \frac{1}{2}}(-ikx) M_{i\eta, \frac{1}{2}}(-iky). \quad (2.16)$$

Здесь $\eta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$, $k = \sqrt{\frac{2m(E \pm i\gamma)}{\hbar^2}} = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $x = r + r' + |r-r'|$, $y = r + r' - |r-r'|$, а $W_{i\eta, \frac{1}{2}}$ и $M_{i\eta, \frac{1}{2}}$ — известные функции Уиттекера.

При $r' = 0$ выражение для ф. Г. упрощается:

$$G_E^{(c) (\pm)}(r, 0) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi r} \Gamma(1 - i\eta) W_{i\eta, \frac{1}{2}}(-2ikr). \quad (2.17)$$

Эта формула была получена впервые в работе Дж. Мейкснера (1933).

Заметим, однако, что наиболее простой вид ф. Г. для кулоновского потенциала принимает в импульсном представлении при использовании свойства инвариантности у. Ш. относительно четырехмерных вращений (при $E < 0$) или преобразований Лоренца (при $E > 0$). При этом удобно ввести функцию

$$G(\xi, \xi') = -\frac{1}{16mk^3} (p^2 \pm k^2)^2 G_E(p, p') (p'^2 \pm k^2)^2. \quad (2.18)$$

Верхний (нижний) знак в этой формуле относится к случаю $E < 0$ ($E > 0$), а единичный четырехмерный вектор ξ имеет вид

$$\xi = \frac{2kp}{p^2 \pm k^2}, \quad \xi_0 = \frac{k^2 \mp p^2}{p^2 \pm k^2}. \quad (2.19)$$

Как было показано Ю. Швингером (1964), при $E < 0$ $G(\xi, \xi')$ может быть представлена в виде

$$G(\xi, \xi') = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{Y_{nlm}(\xi) Y_{nlm}^*(\xi')}{1 + \frac{\eta}{n}}, \quad (2.20)$$

где $Y_{nlm}(\xi)$ — четырехмерные сферические функции. После выполнения суммирования по l и m получаем

$$\left. \begin{aligned} G(\xi, \xi') &= \delta(\xi - \xi') - \frac{\eta}{2\pi^2 (\xi - \xi')^2} + \\ &+ \frac{\eta^2}{4\pi^2 i \sin \chi} [\Phi(e^{i\chi}, \eta) - \Phi(e^{-i\chi}, \eta)], \\ \Phi(z, \eta) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n + \eta}, \quad (\xi, \xi') = \cos \chi. \end{aligned} \right\} \quad (2.21)$$

Выражение для ф. Г. $G(\xi, \xi')$ при $E > 0$ было получено в работе А. М. Переломова, В. С. Попова (1966):

$$G^{(\pm)}(\xi, \xi') = \int d\rho g_{ij}(\rho) \sum_{lm} Y_{\rho lm}(\xi) Y_{\rho lm}^*(\xi'), \quad (2.22)$$

$$\left. \begin{aligned} g_{11}^{(\pm)}(\rho) &= \left(1 - \frac{2\eta}{\rho} \operatorname{cth} \frac{\pi\rho}{2}\right) \frac{\rho^{2/4}}{\rho^{2/4} - \eta^2 \pm i\gamma}, \\ g_{12}^{(\pm)}(\rho) &= g_{21}^{(\pm)}(\rho) = \frac{2\eta}{\rho \operatorname{sh} \frac{\pi\rho}{2}} \frac{\rho^{2/4}}{\rho^{2/4} - \eta^2 \pm i\gamma}, \\ g_{22}^{(\pm)}(\rho) &= -\left(1 + \frac{2\eta}{\rho} \operatorname{cth} \frac{\pi\rho}{2}\right) \frac{\rho^{2/4}}{\rho^{2/4} - \eta^2 \pm i\gamma}. \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

Здесь функции $Y_{\rho lm}$ аналогичны сферическим функциям для двуполостного гиперboloида $\xi_0^2 - \xi^2 = 1$, а индексы i, j указывают расположение концов векторов ξ и ξ' на полостях гиперboloида: $i = 1(2)$, если ξ лежит на верхней (нижней) полости; аналогично, индекс j связан с положением ξ' .

§ 3. Некоторые свойства функции Грина

Как было показано в предыдущем параграфе, ф. Г. трехмерного у. Ш. выражается через ф. Г. радиального уравнения. Поэтому займемся сначала только последней. Рассмотрим

$$G_{k_0 l}^{(+)}(r, r') = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k_0} \chi_{k_0 l}^{(+)}(r_>) \chi_{k_0 l}(r_<).$$

Как видно из этого выражения, $G_{k_0 l}^{(+)}$ как функция k_0 аналитична всюду в верхней полуплоскости, кроме изолированных точек $k = k_{nl}$ на мнимой оси (связанные состояния), где она имеет полюса. Вблизи полюсов она при больших r и r' ведет себя как

$$\begin{aligned} G_{kl}^{(+)}(r, r') \xrightarrow{k \rightarrow k_{nl}} & -\frac{1}{k_{nl}} \frac{(-1)^l}{2i} e^{2i\delta_l(k)} e^{-|k_{nl}|(r+r')} = \\ & = \frac{1}{2k_{nl}} \frac{1}{k - k_{nl}} |A_{nl}|^2 e^{-|k_{nl}|(r+r')}. \end{aligned}$$

Это выражение наводит на мысль, что при любых значениях r и r'

$$G_{kl}^{(+)}(r, r') \xrightarrow{k \rightarrow k_{nl}} \frac{1}{2k_{nl}} \frac{\chi_{nl}(r) \chi_{nl}^*(r')}{k - k_{nl}} = \frac{\chi_{nl}(r) \chi_{nl}^*(r')}{k^2 - k_{nl}^2}, \quad (3.1)$$

где χ_{nl} — это нормированная волновая функция n -го связанного состояния. И действительно, эта формула всегда имеет место. За исключением полюсов в точках $k = k_{nl}$, ф. Г. не имеет в верхней полуплоскости k никаких особенностей. При $|k| \rightarrow \infty$ и $r > r'$ она экспоненциально затухает. Проще всего это можно увидеть из ее асимптотического выражения:

$$G_{kl}^{(+)}(r, r') \xrightarrow{|k| \rightarrow \infty} -\frac{1}{k} \frac{1}{2i} (e^{ik(r+r')} (-1)^l S_l(k) - e^{ik(r-r')}),$$

куда надо подставить $k = k_1 + ik_2$ ($k_2 > 0$); из этого же выражения видно, что в нижней полуплоскости k функция $G^{(+)}$ экспоненциально расходится при $|k| \rightarrow \infty$ и имеет полюса в точках, где расположены полюса величины $S_l(k)$. В дальнейшем будет показано, что полюсам $S_l(k)$ в нижней полуплоскости соответствуют так называемые квазистационарные состояния.

Таким образом, полюса $G_{kl}^{(+)}$ в верхней полуплоскости соответствуют стационарным состояниям, а в нижней — квазистационарным.

Несколько важных теорем можно доказать с помощью интегрального представления ф. Г.

$$G_{kl}^{(+)}(r, r') = \sum_n \frac{\chi_{nl}(r) \chi_{nl}^*(r')}{k^2 - k_n^2 + i\gamma} + \int_0^\infty dk' \frac{\chi_{k'l}(r) \chi_{k'l}^*(r')}{k^2 - k'^2 + i\gamma}. \quad (3.2)$$

Интегрируя (3.2) по k^2 , получаем

$$\int_{-\infty}^\infty dk^2 G_{kl}^{(+)}(r, r') = -\pi i \left\{ \sum_n \chi_{nl}(r) \chi_{nl}^*(r') + \int_0^\infty dk' \chi_{k'l}(r) \chi_{k'l}^*(r') \right\} = -\pi i \delta(r - r'). \quad (3.3)$$

Если ввести какой-либо обрезывающий множитель $C(k^2) \rightarrow 0$, не имеющий особенностей в верхней полуплоскости k^2 , например $C_1(k^2) = e^{iak^2}$ с положительным $a \rightarrow 0$, то получаем, замыкая контур сверху:

$$\int_{-\infty}^\infty G_{kl}^{(+)}(r, r') C_1(k^2) dk^2 = 0. \quad (3.4)$$

Если же обрезывающий множитель не имеет особенностей в нижней полуплоскости, например

$$C_2(k^2) = e^{-iak^2}, \quad a > 0,$$

то, замыкая контур снизу, приходим к формуле

$$\int_{-\infty}^\infty dk^2 G_{kl}^{(+)}(r, r') C_2(k^2) = -2\pi i \delta(r - r'). \quad (3.5)$$

Представление (3.2) позволяет получить еще одну интересную формулу

$$\int_0^\infty dr' G_{kl}^{(+)}(r, r') \chi_{k'l}(r') = \frac{\chi_{k'l}(r)}{k^2 - k_1^2 + i\gamma}, \quad (3.6)$$

доказательство которой основано лишь на ортонормированности функций χ_{kl} .

Точно таким же образом можно получить и все основные свойства функции $G_{kl}^{(-)}$. Мы не будем, однако, этого делать, так как $G^{(-)}$ почти не встречается в расчетах.

Аналитические свойства ф. Г. трехмерного у. Ш. являются тривиальным обобщением соответствующих свойств ф. Г. радиального уравнения. В частности, вместо (3.3), (3.6) имеем

$$\int_{-\infty}^\infty dE G_E^{(\pm)}(r, r') = \mp \pi i \delta(r - r'), \quad (3.3')$$

$$\int dr' G_E^{(\pm)}(r, r') \psi_p^{(\pm)}(r') = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{\psi_p^{(\pm)}(r)}{k^2 - p^2 \pm i\gamma}. \quad (3.6')$$

§ 4. Функция Грина для нескольких свободных частиц

Пользуясь стандартным методом, можно находить гриновские функции для случая нескольких не взаимодействующих друг с другом частиц. В случае двух частиц, например, у. Ш. имеет вид

$$(H_1 + H_2 - E)\psi_E = \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 + U_1(\mathbf{r}_1) \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U_2(\mathbf{r}_2) \right) - E \right\} \psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (4.1)$$

где \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 — координаты частиц, m_1 и m_2 — их массы, U_1 и U_2 — потенциалы действующих на них полей, а H_1 и H_2 — соответствующие гамильтонианы. В качестве полного набора функций этого уравнения можно взять все возможные произведения типа $\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2)$, где ψ_{k_1} , ψ_{k_2} — собственные функции гамильтонианов H_1 и H_2 . Составляя затем выражение, аналогичное (2.5), и производя соответствующие интегрирования, нетрудно найти ф. Г.:

$$G_k^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = \mp \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_\varepsilon^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) G_{E-\varepsilon}^{(\pm)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2), \quad (4.2)$$

где $G_\varepsilon(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1)$ и $G_{E-\varepsilon}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2)$ — ф. Г. операторов $(H_1 - \varepsilon)$ и $(H_2 - (E - \varepsilon))$ соответственно. Для проверки этой формулы подействуем на правую часть оператором $(H_1 + H_2 - E)$. При этом с помощью формул предыдущего параграфа получаем

$$\begin{aligned} & \mp \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [(H_1 - \varepsilon) + \\ & \quad + (H_2 - (E - \varepsilon))] G_\varepsilon^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) G_{E-\varepsilon}^{(\pm)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) = \\ & = \mp \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \{ \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) G_{E-\varepsilon}^{(\pm)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) + \\ & \quad + \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) G_\varepsilon^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2), \quad (4.3) \end{aligned}$$

т. е. правая часть (4.2) действительно является ф. Г. уравнения (4.1).

Аналогично можно рассмотреть случаи трех и более частиц. В общем случае N не взаимодействующих частиц у. Ш. имеет вид

$$\left(\sum_{i=1}^N H_i - E \right) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = 0, \quad (4.4)$$

а для ф. Г. нетрудно получить формулу

$$\begin{aligned} G_E^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) &= \\ &= \frac{1}{N} \frac{1}{(\mp \pi i)^{N-1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 \dots d\varepsilon_{N-1} G_{\varepsilon_1}^{(\pm)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) G_{\varepsilon_2}^{(\pm)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \dots \\ & \quad \dots G_{\varepsilon_{N-1}}^{(\pm)}(\mathbf{r}_{N-1}, \mathbf{r}'_{N-1}) G_{E_N}^{(\pm)}(\mathbf{r}_N, \mathbf{r}'_N), \quad (4.5) \end{aligned}$$

где $E_N = E - \sum_{i=1}^{N-1} \varepsilon_i$; здесь знаки $+$ и $-$ соответствуют случаям, когда все частицы разлетаются от центра (знак $+$), либо когда все частицы сходятся к центру (знак $-$).

При пользовании формулами (4.2) и (4.5) существен способ обхода полюсов ф. Г., соответствующих связанным состояниям. Рецепт здесь очень прост. Поскольку при доказательстве этих формул использовались интегральные свойства ф. Г. (3.3'), постольку обход полюсов в (4.2) — (4.5) должен быть таким же, что и в (3.3'). Другими словами, интегрирование по ε должно идти по действительной оси, а положение полюсов гриновских функций, составляющих подынтегральное выражение, автоматически фиксируется знаком перед бесконечно малой γ в формуле (2.5). Практически это означает, что при интегрировании $G_E^{(+)}$ надо вместо E подставить $E_1 + i\delta$ ($\delta > 0$) и интегрировать по E_1 , а при интегрировании $G_E^{(-)}$ заменить E на $E_1 - i\delta$.

Чтобы закончить наш краткий обзор свойств ф. Г., рассмотрим их поведение при близких друг к другу значениях аргументов. Мы видели выше, что одномерная (радиальная) ф. Г. $G_{kl}(r, r')$ остается конечной при $r = r'$, а ее производная по r или r' терпит в этой точке

разрыв. Функция Грина $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ трехмерного у. Ш. при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ обращается в бесконечность как $\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$. Это видно из следующих соображений: каждый член в (2.10) остается конечным при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. Поэтому всякая сингулярность функции может возникать лишь из-за слабой сходимости ряда (2.10) при больших l . С другой стороны, как мы увидим в следующем параграфе, волновые функции χ_{kl} в потенциале $U(r)$ стремятся к функциям свободного движения при больших l :

$$\chi_{kl}(\mathbf{r}) \underset{l \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right).$$

Соответственно этому радиальная гриновская функция также стремится к ф. Г. $\bar{G}_{kl}^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ у. Ш. без потенциала:

$$G_{kl}^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \underset{l \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{k} e^{\pm\left(kr > -\frac{\pi l}{2}\right)} \sin\left(kr < -\frac{\pi l}{2}\right) \equiv \bar{G}_{kl}^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (4.6)$$

Таким образом, $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ имеет ту же сингулярность, что и в случае у. Ш. без потенциала, а в этом случае гриновская функция $\bar{G}_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ вычисляется до конца и, как мы знаем, равна

$$\begin{aligned} \bar{G}_k^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int dp \frac{e^{ip(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - p^2 \pm i\gamma} = \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \end{aligned}$$

Это и доказывает сделанное выше утверждение о характере расходимости трехмерной ф. Г. при $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$. Как следствие отсюда сразу же вытекает, что во всех физически интересных случаях разность

$$G_k^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \bar{G}_k^{(\pm)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

уже не содержит сильной сингулярности при $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ (за исключением, конечно, сингулярностей, обусловленных связанными состояниями, когда гриновская функция обращается в бесконечность, как функция k , при всех значениях \mathbf{r} и \mathbf{r}').

Аналогичным образом можно рассмотреть многочастичные ф. Г. (4.5). Их расходимость при $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}'_i$ также связана с большими орбитальными моментами. Однако характер расходимости при этом изменяется. Так, например, двухчастичная ф. Г. (4.2) при совпадающих значениях аргументов ведет себя как

$$\frac{1}{[(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)^2 + (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2)^2]^2}.$$

§ 5. Теория возмущений. Координатное представление

Теория возмущений является, пожалуй, самой ходовой и общеизвестной главой квантовой механики*). Ей посвящена обширная литература, и мы будем поэтому предельно краткими. Задача ставится следующим образом: пусть известны все собственные функции $\psi_k^{(0)}$ и собственные значения у. Ш.:

$$H_0 \psi_k^{(0)} = E \psi_k^{(0)}. \quad (5.1)$$

Требуется найти поправки к собственным функциям и собственным значениям, возникающие при добавлении к гамильтониану H_0 небольшого возмущения W . Рассмотрим сначала задачу о рассеянии. Наиболее общий метод состоит в том, что решение возмущенного уравнения

$$(H_0 + W - E) \psi_k(\mathbf{r}) = 0 \quad (5.2)$$

ищется в виде

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \varphi_k, \quad (5.3)$$

где добавка φ_k предполагается малой. Для φ_k имеем уравнение

$$(H_0 - E) \varphi_k = -W(\psi_k^{(0)} + \varphi_k). \quad (5.4)$$

*) Существует несколько видов теории возмущений. Наиболее часто используется теория возмущений Рэлея—Шредингера (Э. Шредингер, 1926В, см. также К. Шварц, 1959). В этом случае мы разлагаем в ряд по малому параметру как волновую функцию, так и собственное значение энергии. Из других видов отметим теорию возмущений Л. Бриллюэна (1933), Е. Вигнера (1935) (см. также Е. Финберг, 1958), когда в ряд разлагается только волновая функция.

Вводя ф. Г. $G_E(r, r')$ невозмущенного оператора ($H_0 - E$), перепишем (5.4) в виде интегрального уравнения

$$\varphi_k(r) = - \int dr' G_E(r, r') W(\psi_k^{(0)}(r') + \varphi_k(r')). \quad (5.5)$$

Последовательные итерации этого уравнения позволяют найти φ_k с любой степенью точности. С точностью до членов второго порядка по W имеем, например,

$$\varphi_k = - \int dr' G_E(r, r') W \psi_k^{(0)}(r') + \int \int dr' dr'' G_E(r, r') W G_E(r', r'') W \psi_k^{(0)}(r''). \quad (5.6)$$

Вся задача, таким образом, сводится к нахождению ф. Г. G_E и практическому вычислению ряда (5.6). В случае произвольного гамильтониана H_0 ф. Г. имеет вид

$$G_E^{(+)}(r, r') = \sum_{nlm} \frac{\psi_{nlm}^{(0)}(r) \psi_{nlm}^{(0)*}(r')}{E - E_{nl}} + \int \frac{dp \psi_p^{(0)}(r) \psi_p^{(0)*}(r')}{E - E_p + i\gamma},$$

и для ее нахождения требуется значение всех собственных функций и собственных значений невозмущенного уравнения. Это чрезвычайно усложняет вычисления ряда (5.6).

Положение сильно упрощается, однако, если мы рассматриваем рассеяние на потенциале, т. е. если невозмущенный гамильтониан имеет вид

$$H_0 = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r).$$

Из предыдущих параграфов известно, что для нахождения ф. Г. G_E необходимо знание лишь решений у. Ш. при этом же значении энергии E (см. (1.11) и (2.9)). Благодаря этому формулы теории возмущений сильно упрощаются. В первом порядке по возмущению, например, имеем, предполагая W сферически-симметричным,

$$\varphi_k(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{kr} \sum_l i^l e^{i\delta_l} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_{l0} \left(\frac{kr}{kr} \right) \times \int_0^\infty dr' G_{kl}^{(+)}(r, r') W \chi_{kl}(r'). \quad (5.7)$$

Здесь для $G_E(r, r')$ была использована формула (2.10), а для $\psi_k^{(0)}$ формула (3.4) гл. II.

Во всех приведенных выше формулах следует использовать ф. Г. $G^{(+)}$, соответствующие расходящимся волнам. Это легко видеть из следующих соображений. Сходящиеся волны в невозмущенной функции $\psi_k^{(0)}$ определяются внешними условиями: тем потоком, который направляется на силовой центр из бесконечности. Этот поток можно считать заданным и не зависящим от вида взаимодействия.

Таким образом, добавка к потенциалу возмущения W изменит лишь расходящиеся волны. А это в свою очередь означает, что надо использовать именно функции $G^{(+)}$.

Для того чтобы найти асимптотику φ при больших r , используем (2.13). При этом получаем (в первом порядке теории возмущений)

$$\varphi_k(r) \sim - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{2m}{\hbar^2} \int dr' \psi_{kn}^{(0)(-)*}(r') W \psi_k^{(0)}(r'), \quad (5.8)$$

где мы ввели единичный вектор $n = r/r$. Следует обратить внимание на то, что в матричный элемент в качестве волновой функции конечного состояния входит функция $\psi_{kn}^{(0)(-)}$. Это связано, как уже упоминалось выше, с тем, что эти функции описывают волну частиц, уходящих после рассеяния в строго заданном направлении (по направлению вектора kn).

С помощью формул этого параграфа легко найти поправку к амплитуде рассеяния, вызываемую возмущением^{*}). В первом порядке по W амплитуда рассеяния

^{*}) Отметим следующий очевидный недостаток обычной теории возмущений: полученная с ее помощью амплитуда рассеяния не удовлетворяет условию унитарности. В связи с этим был развит так называемый N/D метод (Дж. Чью, С. Мандельстам, 1960; М. Ида, 1963), в рамках которого данный недостаток отсутствует. Сравнение численных решений по этому методу с точными решениями можно найти в работах Дж. Бьеркена и А. Гольдберга (1960); П. Кантора (1965). Своеобразный метод теории возмущений в рамках формализма S -матрицы был развит в работах Ф. Дашена и С. Фраучи (1964), Д. Шарпа (1965).

равна

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_{l0} \left(\frac{kr}{kr} \right) \left(e^{2i(\delta_l^{(0)} + \Delta\delta_l)} - 1 \right). \quad (5.9)$$

Здесь $\delta_l^{(0)}$ — невозмущенные значения фаз рассеяния, а

$$\Delta\delta_l = -\frac{\pi}{k} \frac{m}{\hbar^2} \int dr' \chi_{kl}^*(r') W \chi_{kl}(r'), \quad (5.10)$$

где $\chi_{kl}(r)$ — нормированные на $\delta(k - k')$ радиальные функции невозмущенного уравнения.

Необходимым условием применимости теории возмущений является условие $|\varphi_k| \ll |\psi^{(0)}|$.

Если возмущение W локализовано внутри некоторого объема V , то приведенные выше формулы применимы:

1) если $W \rightarrow 0$,

2) при любой величине W , но при $l \rightarrow \infty$ или $k \rightarrow \infty$.

Первый пункт очевиден, а второй связан с тем, что входящие в теорию возмущений интегралы малы:

а) при $k \rightarrow \infty$ из-за того, что невозмущенные волновые функции сильно осциллируют;

б) при $l \rightarrow \infty$ из-за того, что функции χ_{kl} очень малы, если энергия E частиц меньше центробежной энергии, т. е. при $r < l/k$.

Именно на этом основаны рассуждения предыдущего параграфа о характере расходимости гриновских функций при близких значениях аргументов. Соответствующие оценки тривиально получаются из приведенных выше формул.

В случае функций дискретного спектра задача теории возмущений усложняется, так как, кроме поправок к волновым функциям, необходимо найти и поправки ΔE_{nl} к энергиям связанных состояний. Стандартная процедура теории возмущений в этом случае хорошо известна, и мы на ней останавливаться не будем. Отметим лишь, что нахождение поправок к волновым функциям требует знания всех собственных функций невозмущенного уравнения. В случае потенциального взаимодействия, однако, можно (как и для задачи рассеяния) предложить метод (Я. Б. Зельдович, 1956), в котором ис-

пользуются решения невозмущенного уравнения лишь при одном значении энергии.

Уравнение для радиальной волновой функции имеет теперь вид

$$\chi_{nl}'' + \left(k_{nl}^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - V - \omega \right) \chi_{nl} = 0, \quad (5.11)$$

где $\omega = \frac{2m}{\hbar^2} W$, а k_{nl}^2 обычным образом связано с новым значением энергии связанного состояния. Будем искать решение в виде

$$\chi_{nl} = C_1(r) \chi_{nl}^{(0)}(r) + C_2(r) \varphi_{nl}^{(0)}(r), \quad (5.12)$$

где C_1 и C_2 — пока неизвестные функции, а $\varphi_{nl}^{(0)}$ и $\chi_{nl}^{(0)}$ — соответственно нерегулярное и регулярное решения невозмущенного уравнения, вычисленные при энергии $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_{nl}^{(0)})^2$ невозмущенного связанного состояния. Относительно функций C_1 и C_2 будем предполагать, что они удовлетворяют условию

$$C_1' \chi_{nl}^{(0)} + C_2' \varphi_{nl}^{(0)} = 0. \quad (5.13)$$

В теории дифференциальных уравнений это условие называется условием Лагранжа. Подставляя (5.12) в (5.11) и учитывая (5.13), получаем для C_1' и C_2' точные уравнения:

$$\left. \begin{aligned} C_1' &= -\frac{\varphi(r)}{D} v (C_1 \chi(r) + C_2 \varphi(r)), \\ C_2' &= \frac{\chi(r)}{D} v (C_1 \chi(r) + C_2 \varphi(r)), \end{aligned} \right\} \quad (5.14)$$

где мы для простоты письма опустили индексы у $\chi_{nl}^{(0)}$ и $\varphi_{nl}^{(0)}$ и ввели обозначения

$$\left. \begin{aligned} v(r) &= k_{nl}^2 - (k_{nl}^{(0)})^2 - \omega, \\ D &= \varphi \chi' - \varphi' \chi. \end{aligned} \right\} \quad (5.15)$$

Для решения системы (5.14) используем теорию возмущений. В первом приближении мы обязаны положить в правой части уравнений $C_1 = 1$ и $C_2 = 0$. Кроме того, необходимо учесть, что волновая функция должна быть везде конечной и, следовательно, должны выполняться условия

$$C_2(0) = C_2(\infty) = 0, \quad (5.16)$$

так как φ расходится в нуле как r^{-1} , а на бесконечности как $e^{|k_{nl}^{(0)}|r}$. Все это вместе дает:

$$\left. \begin{aligned} C_1(r) &= 1 - \frac{1}{D} \int_0^r v(\rho) \chi(\rho) \varphi(\rho) d\rho, \\ C_2(r) &= \frac{1}{D} \int_0^r v(\rho) \chi^2(\rho) d\rho. \end{aligned} \right\} \quad (5.17)$$

Первое условие (5.16), очевидно, выполняется. Из второго условия находим k_{nl}^2 в этом приближении:

$$\Delta^{(1)}(k_{nl}^2) = (k_{nl}^{(1)})^2 - (k_{nl}^{(0)})^2 = \int_0^\infty w(\rho) \chi^2(\rho) d\rho. \quad (5.18)$$

Здесь подразумевается условие нормировки $\int_0^\infty \chi^2(\rho) d\rho = 1$.

Формулы (5.12) и (5.17) решают задачу о нахождении замкнутого выражения для возмущенной волновой функции связанного состояния в линейном по w приближении. Выражение (5.18), определяющее поправку к энергии связанного состояния, не представляет ничего нового по сравнению с обычной формулой первого приближения теории возмущений. Преимущества изложенного метода проявляются лишь при вычислении поправок к энергии в более высоких приближениях. Получим, например, поправку к энергии во втором приближении. Подставляя (5.17) в правую часть системы (5.14), можно элементарно определить $C_2(r)$. Условие $C_2(\infty) = 0$

тогда сразу приводит к следующему значению для сдвига энергии:

$$\begin{aligned} \Delta^{(2)}(k_{nl}^2) &= \Delta^{(1)}(k_{nl}^2) + \\ &+ \frac{1}{2D} \int_0^\infty \int_0^\infty d\rho d\sigma [\Delta^{(1)}(k_{nl}^2) - w(\rho)] [\Delta^{(1)}(k_{nl}^2) - w(\sigma)] \times \\ &\times \chi(\rho) \chi(\sigma) [\chi(\rho) \varphi(\sigma) + \varphi(\rho) \chi(\sigma)]. \end{aligned} \quad (5.19)$$

В эту формулу, как и во все остальные, получаемые с помощью этого метода, вместо полного набора функций невозмущенного уравнения входят только две функции φ и χ . Таким образом, введение в рассмотрение нерегулярного решения оказывается эквивалентным введению полного набора везде регулярных функций χ_{nl}, χ_{kl} !

Независимость вронскиана D от r позволяет выразить φ через χ :

$$\varphi(r) = -\chi(r) D \int_a^r \frac{d\rho}{\chi^2(\rho)}. \quad (5.20)$$

Это означает, что фактически всю теорию возмущений можно построить, пользуясь лишь регулярным невозмущенным решением χ_{nl} .

§ 6. Импульсное представление

Во многих случаях удобнее пользоваться не координатным, а импульсным представлением. В частности, импульсное представление оказывается предпочтительным при решении задач о поведении систем, состоящих из большого числа частиц (нерелятивистская задача нескольких взаимодействующих частиц, задачи теории поля и т. д.). О причинах такого предпочтения будет подробно говориться ниже, а сейчас мы займемся техническими вопросами, связанными с переходом от координатного представления к импульсному.

Рассмотрим уравнение Шредингера для частицы в поле

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) - E\right) \psi_k(r) = 0.$$

Переход к импульсному представлению осуществляется введением вместо волновой функции $\psi_k(\mathbf{r})$ ее фурье-компоненты $\varphi_k(\mathbf{q})$:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \varphi_k(\mathbf{q}) d\mathbf{q}, \quad (6.1a)$$

$$\varphi_k(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_k(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (6.1б)$$

Подстановка (6.1a) в исходное уравнение Шредингера приводит к уравнению для $\varphi_k(\mathbf{q})$ — у. Ш. в импульсном представлении:

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E\right) \varphi_k(\mathbf{q}) + \int U(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \varphi_k(\mathbf{q}') d\mathbf{q}' = 0, \quad (6.2)$$

где

$$U(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i(\mathbf{q} - \mathbf{q}')\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (6.3)$$

Наиболее примечательной особенностью уравнения (6.2) является то, что это интегральное уравнение, а не дифференциальное. При этом оператор кинетической энергии частицы является теперь оператором умножения на число:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_k(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \varphi_k(\mathbf{q});$$

зато потенциальная энергия U является теперь интегральным оператором:

$$U(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}) \rightarrow \int U(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \varphi_k(\mathbf{q}') d\mathbf{q}'.$$

Выясним, каков вид волновой функции $\varphi(\mathbf{q})$ в импульсном представлении. Для этого рассмотрим сначала уравнение свободного движения (с $U \equiv 0$) с источником в правой части

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E\right) \varphi_k(\mathbf{q}) = Q(\mathbf{q}). \quad (6.4)$$

Пусть энергия положительна и равна $E \equiv \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$. Уравнение (6.4) имеет, очевидно, частные решения

$$\varphi_k^{(\pm)}(\mathbf{q}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Q(\mathbf{q})}{q^2 - (k_0^2 \pm i\gamma)}, \quad \gamma \rightarrow +0. \quad (6.5)$$

В это выражение нам пришлось ввести бесконечно малую положительную постоянную γ , чтобы избежать неприятностей и неопределенностей, связанных с обращением в нуль знаменателя при $q = k_0$.

В координатном представлении решениям $\varphi^{(-)}$ и $\varphi^{(+)}$ соответствуют решения, имеющие вид сходящихся и расходящихся волн. Чтобы убедиться в этом, перейдем в (6.5) обратно к координатному представлению:

$$\begin{aligned} \psi_k^{(\pm)}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \varphi^{(\pm)}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{Q(\mathbf{q}) d\mathbf{q}}{q^2 - (k_0^2 \pm i\gamma)}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Выберем \mathbf{r} в качестве полярной оси и явно выпишем зависимость $Q(\mathbf{q})$ от декартовых координат:

$$Q(\mathbf{q}) \equiv Q(q_x, q_y, q_z).$$

Вводя обозначение $\xi = \frac{\mathbf{q}\mathbf{r}}{qr}$, получаем

$$\begin{aligned} \psi_k^{(\pm)}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^1 d\varphi \int_{-1}^1 d\xi \frac{q^2 dq e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{q^2 - (k_0^2 \pm i\gamma)} \times \\ &\times Q(q \sqrt{1 - \xi^2} \cos \varphi, q \sqrt{1 - \xi^2} \sin \varphi, q\xi). \end{aligned}$$

Интегрирование по частям по ξ дает

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 d\xi e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}\xi} Q &= \frac{1}{iqr} \{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} Q(0, 0, q) - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} Q(0, 0, -q)\} - \\ &- \frac{1}{iqr} \int_{-1}^1 e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}\xi} \frac{\partial Q}{\partial \xi} d\xi. \end{aligned}$$

Последний член здесь, как это видно при дальнейшем интегрировании по частям, имеет порядок $1/r^2$ и может быть отброшен при вычислении асимптотического поведения волновой функции. Таким образом (обозначим

$Q(0, 0, q)$ через $Q(q)$, асимптотически при больших r

$$\begin{aligned} \psi_k^{(\pm)}(r) &\sim \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{ir} \int_0^\infty \frac{q dq}{q^2 - (k_0^2 \pm i\gamma)} [e^{iqr}Q(q) - e^{-iqr}Q(-q)] = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{ir} \int_{-\infty}^\infty \frac{qQ(q)e^{iqr}}{q^2 - (k_0^2 \pm i\gamma)} dq. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Здесь при переходе к последнему интегралу мы воспользовались тем, что оба члена в квадратной скобке переходят друг в друга при изменении знака q .

Предположим теперь для простоты, что $Q(q)$ как функция комплексной переменной q не имеет особенностей в верхней полуплоскости*). В этом случае можно замкнуть контур интегрирования в (6.7) сверху, и прямое вычисление вычетов дает

$$\begin{aligned} \psi_k^{(\pm)}(r) &\sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} Q(\pm k_0) \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{\pm ik_0 r}}{r}; \\ Q(\pm k_0) &\equiv Q(0, 0, \pm k_0) \equiv Q\left(\pm k_0 \frac{r}{r}\right). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Таким образом, действительно, два частных решения (6.5) имеют в координатном представлении вид сходящихся и расходящихся волн. Знаку «+» в знаменателе формулы (6.5) при положительной γ соответствует расходящаяся волна, а знаку «-» — сходящаяся.

Отрицательному значению энергии E отвечало бы мнимое k_0 : $k_0 = i|k_0|$. При этом решение $\psi^{(+)}(r)$ обращалось бы в нуль при $r \rightarrow \infty$, а $\psi^{(-)}(r)$ — стремилась бы к бесконечности как $\frac{1}{r} e^{+|k_0|r}$.

Заметим теперь, что однородное уравнение (6.4) имеет решением функции

$$\varphi_k^{(0)}(q) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad \text{с} \quad |\mathbf{k}| = k_0. \quad (6.9)$$

При каждом положительном E имеется бесконечное множество таких решений, отличающихся направлением

*) Такие особенности, расположенные в точках $q = q_1 + iq_2$ ($q_2 > 0$), привели бы к появлению членов типа $\exp(iq_1 r - q_2 r)$, которые не дают вклада в асимптотику.

вектора \mathbf{k} . В координатном представлении этим решениям отвечают плоские волны:

$$\psi_k^{(0)}(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{iqr} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) dq = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}r}.$$

То, что функции (6.9) действительно удовлетворяют однородному уравнению (6.4)

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E\right) \varphi_k^{(0)}(q) = 0, \quad (6.4')$$

вполне очевидно: при $|\mathbf{q}| \neq |\mathbf{k}|$ сама функция $\varphi_k^{(0)}(q)$ равна нулю, так что (6.4') выполняется. При $|\mathbf{q}| = |\mathbf{k}|$ функция $\varphi_k^{(0)}(q)$ обращается в бесконечность, но произведение в левой части (6.4') по-прежнему равно нулю из-за обращения в нуль скобки $\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E\right)$ при $q = k = k_0$. Формально мы здесь имеем дело с неопределенностью типа $0 \cdot \infty$. Однако эта неопределенность легко раскрывается, если воспользоваться свойствами δ -функции. Именно, интеграл от произведения любой неособенной функции $\Phi(q)$ на левую часть (6.4') тождественно равен нулю при $k = k_0$:

$$\begin{aligned} \int \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E\right) \varphi_k^{(0)}(q) \Phi(q) dq &= \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int (q^2 - k_0^2) \delta(q - k) \Phi(q) dq = 0. \end{aligned}$$

Так как функция $\Phi(q)$ произвольна, то произведение $\frac{\hbar^2}{2m} (q^2 - k_0^2) \delta(q - k)$ следует рассматривать как тождественный нуль при $|\mathbf{k}| = k_0$.

Таким образом, функция

$$\varphi_k^{(+)}(q) = \varphi_k^{(0)}(q) + \frac{Q(q)}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - (E + i\gamma)}, \quad (6.10)$$

равно как и функция

$$\varphi_k^{(-)}(q) = \varphi_k^{(0)}(q) + \frac{Q(q)}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - (E - i\gamma)}, \quad (6.10')$$

является решениями у.Ш. (6.4) при положительной энергии.

При отрицательных энергиях E однородное уравнение (6.4') решений не имеет, так как в этом случае скобка $\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E\right) = \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + |E|\right)$ и ни при каких действительных q не обращается в нуль. Соответственно этому единственным решением уравнения (6.4) при $E < 0$ является функция

$$\Phi(q) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Q(q)}{q^2 + \frac{2m}{\hbar^2} |E|}.$$

Вернемся теперь к исходному у.Ш. (6.2), описывающему в импульсном представлении движение частицы с энергией E в потенциале U . Перепишем это уравнение, перенеся интегральный член направо, чтобы оно приняло вид уравнения с источником

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E\right) \Phi_k(q) = - \int U(q - q') \Phi_k(q') dq'. \quad (6.11)$$

Мы знаем, что волновые функции непрерывного спектра можно нумеровать различным образом. Если считать заданными энергию E и импульс $\hbar \mathbf{k}$, падающих на рассеиватель частиц, то в волновую функцию вектор \mathbf{k} входит как параметр. Поэтому в координатном представлении волновая функция зависит от двух векторов \mathbf{k} и \mathbf{r} . В импульсном представлении вектор \mathbf{r} заменяется импульсной переменной \mathbf{q} . Кроме того, оказывается удобным выделить в качестве независимой переменной энергию $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Всего, таким образом, в волновую функцию входят одна скалярная (E) и две векторные (\mathbf{k} и \mathbf{q}) переменные. Из приведенных в начале этого параграфа формул видно, что при любом положительном значении энергии E решениями уравнения (6.11) являются функции

$$\Phi_k^{(+)}(q) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \frac{t(q, \mathbf{k}, E)}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - (E + i\gamma)}, \quad (6.12)$$

где обозначено

$$t(q, \mathbf{k}, E) \equiv \int U(q - q') \Phi_k^{(+)}(q') dq'. \quad (6.13)$$

Входящий в (6.12) и (6.13) волновой вектор \mathbf{k} связан с энергией E условием $\hbar k = \sqrt{2mE}$, тогда как вектор \mathbf{q} — переменная импульсного представления — может пробегать все действительные значения.

Как следует из (6.6 — 6.8), при переходе в координатное представление из функции $\Phi_k^{+}(\mathbf{q})$ получается функция $\Psi_k^{+}(\mathbf{r})$ с асимптотикой

$$\begin{aligned} \Psi_k^{+}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Phi_k^{+}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} \sim \\ &\sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} t\left(\mathbf{k} \frac{\mathbf{r}}{r}, \mathbf{k}, E\right) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \right]. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Таким образом, асимптотика волновой функции в координатном представлении зависит только от величины $t(q, \mathbf{k}, E)$ при $q = k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Значения функции $t(q, \mathbf{k}, E)$ при другой величине аргумента \mathbf{q} определяют вид волновой функции $\Psi(\mathbf{r})$ при конечных значениях \mathbf{r} . В асимптотику они не входят. Так как, с другой стороны, функция (6.14) обязана являться решением у.Ш. в координатном представлении, то сравнение формулы (6.14) с формулами § 3 гл. II показывает, что $\Phi_k^{+}(\mathbf{q})$ является не чем иным, как фурье-образом ортонормированных решений у.Ш. $\Psi_k^{+}(\mathbf{r})$ с асимптотикой

$$\sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \right]. \quad (6.14')$$

Это совершенно тривиальный результат, так как ничего другого мы и не могли получить. По дороге, однако, мы установили одну формулу, которая нам впоследствии очень пригодится: из сравнения (6.14') с (6.14) следует, что введенная выше величина $t(q, \mathbf{k}, E)$ обладает простым свойством: при $q = k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ она

с точностью до коэффициента совпадает с амплитудой рассеяния $f(\theta)$:

$$t(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E) \Big|_{q=k=V\frac{\hbar^2 m E}{2mE/\hbar^2}} = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} f(\theta), \quad \cos \theta = \frac{\mathbf{qk}}{qk} \quad (6.15)$$

и, кроме того, $t(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E)$ удовлетворяет уравнению, получающемуся при подстановке (6.12) в (6.11):

$$t(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E) = U(\mathbf{q} - \mathbf{k}) - \int U(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \frac{t(\mathbf{q}', \mathbf{k}, E)}{\frac{\hbar^2 q'^2}{2m} - (E + i\gamma)} d\mathbf{q}'. \quad (6.16)$$

Это уравнение, как будет видно ниже, оказывается во многом более удобным, чем исходное у. Ш. (6.2), из которого оно получено.

Формулы (6.12) — (6.14) полностью описывают свойства решений у. Ш. в импульсном представлении при положительных энергиях (непрерывный спектр). При отрицательных энергиях (дискретный спектр) структура решений у. Ш. отличается от (6.12). Именно, аргументация, приведенная выше после (6.10'), показывает, что решение в этом случае обязано иметь вид

$$\varphi^{(+)}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} + |E|} \int U(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \varphi^{(+)}(\mathbf{q}') d\mathbf{q}'. \quad (6.17)$$

Это соотношение является, собственно, уравнением для функций $\varphi(\mathbf{q})$. Уравнения такого типа имеют решения только при некоторых отрицательных значениях E , и, таким образом, уравнение (6.17) определяет одновременно и собственные значения $E_{n,l,m}$, и собственные функции $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{q})$ у. Ш. при отрицательных энергиях.

Отнормированные на единицу, функции $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{q})$ совпадают, как это должно быть, с фурье-образами соответствующих функций координатного представления. Итак, полный набор решений уравнения (6.11) есть

$$\varphi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$\varphi_{n,l,m}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Для них выполняются условия ортонормированности, следующие из (3.13) гл. II:

$$\int \varphi_{\mathbf{k}}^{(+)*}(\mathbf{q}) \varphi_{\mathbf{k}'}^{(+)}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

$$\int \varphi_{n,l,m}^*(\mathbf{q}) \varphi_{n',l',m'}(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

$$\int \varphi_{\mathbf{k}}^{(+)*}(\mathbf{q}) \varphi_{n,l,m}^*(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = 0.$$

§ 7. Функция Грина в импульсном представлении. Операторная алгебра

При построении функции Грина у. Ш. в импульсном представлении можно действовать разными способами. Простейший заключается в том, чтобы взять какую-либо формулу, написанную в координатном представлении, например формулу для решения у. Ш. с источником

$$\psi(\mathbf{r}) = \int G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') Q(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (7.1)$$

и совершить в ней полный переход к фурье-образам:

$$\left. \begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \varphi(\mathbf{q}) d\mathbf{q}, \\ Q(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} Q(\mathbf{q}) d\mathbf{q}, \end{aligned} \right\} (7.2)$$

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} g(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}'} d\mathbf{q} d\mathbf{q}'.$$

При этом получим формулу

$$\varphi(\mathbf{q}) = \int g(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) Q(\mathbf{q}') d\mathbf{q}', \quad (7.1')$$

имеющую точно такую же структуру, как и (7.1). Роль функции Грина $g(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$ в импульсном представлении играет, таким образом, фурье-образ функции Грина в координатном представлении $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ по обеим координатам \mathbf{r} и \mathbf{r}' :

$$g(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}'\mathbf{r}'} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (7.3)$$

Во многих отношениях удобнее, однако, работать с самого начала в импульсном представлении и выводить все формулы без ссылок на соответствующие формулы координатного представления.

Чтобы упростить и унифицировать написание формул, условимся в следующей символике: операторы кинетической и потенциальной энергии обозначим через \hat{h}_0 и \hat{v} , причем результат действия этих операторов на любую функцию импульсной переменной $\varphi(q)$ дается формулами

$$\left. \begin{aligned} \hat{h}_0 \varphi[q] &\equiv \int \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \delta(q - q') \varphi(q') dq' = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \varphi(q), \\ \hat{v} \varphi[q] &\equiv \int U(q - q') \varphi(q') dq'. \end{aligned} \right\} (7.4)$$

Здесь импульсная переменная q , заключенная в квадратные скобки в левых частях формул (7.4), относится не к функции φ , а к результату действия на эту функцию стоящего перед ней оператора.

У. III. для функции непрерывного $\varphi_k^{(+)}(q)$ и дискретного $\varphi_{n,l,m}(q)$ спектров выглядит теперь так:

$$\left. \begin{aligned} (\hat{h}_0 + \hat{v}) \varphi_k^{(+)}[q] &= \varepsilon_k \varphi_k^{(+)}(q); \quad \varepsilon_k \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \text{и} \\ (\hat{h}_0 + \hat{v}) \varphi_{n,l,m}[q] &= \varepsilon_{n,l} \varphi_{n,l,m}^{(+)}(q); \quad \varepsilon_{n,l} < 0. \end{aligned} \right\} (7.5)$$

Функции $\varphi_k^{(+)}$ и $\varphi_{n,l,m}$ составляют полную ортонормированную систему. Они также являются собственными функциями оператора $(\hat{h}_0 + \hat{v} - E)$, отвечающими собственным значениям $(\varepsilon_k - E)$ и $(\varepsilon_{n,l} - E)$ соответственно:

$$\left. \begin{aligned} (\hat{h}_0 + \hat{v} - E) \varphi_k^{(+)}[q] &= (\varepsilon_k - E) \varphi_k^{(+)}(q), \\ (\hat{h}_0 + \hat{v} - E) \varphi_{n,l,m}[q] &= (\varepsilon_{n,l} - E) \varphi_{n,l,m}^{(+)}(q). \end{aligned} \right\} (7.6)$$

Справедливость (7.6) при любом значении E (даже комплексном) очевидна, так как эти равенства при лю-

бом E отличаются от равенств (7.5) только формой (добавлением к правой и левой частям (7.5) одного и того же члена $-E\varphi(q)$), но не по существу.

При построении функции Грина $g(q, q', E)$ оператора $(\hat{h}_0 + \hat{v} - E)$ мы можем пользоваться теперь стандартной процедурой. Строим функцию

$$g(q, q', E) \equiv \sum_{n,l,m} \frac{\varphi_{n,l,m}(q) \varphi_{n,l,m}^*(q')}{\varepsilon_{n,l} - (E + i\gamma)} + \int dk \frac{\varphi_k^{(+)}(q) \varphi_k^{(+)*}(q')}{\varepsilon_k - (E + i\gamma)}. \quad (7.7)$$

Она действительно является функцией Грина, так как (см. уравнение (7.6))

$$\begin{aligned} (\hat{h}_0 + \hat{v} - E) g[q, q', E]_{\gamma \rightarrow 0} &= \\ &= \sum_{n,l,m} \varphi_{n,l,m}(q) \varphi_{n,l,m}^*(q') + \int dk \varphi_k^{(+)}(q) \varphi_k^{(+)*}(q') = \delta(q - q'). \end{aligned} \quad (7.8)$$

В силу этого решением неоднородного у. III.

$$(\hat{h}_0 + \hat{v} - E) \varphi[q] = Q(q) \quad (7.9)$$

является функция

$$\varphi(q) = \int g(q, q', E) Q(q') dq' \equiv \hat{g}_E Q[q]. \quad (7.10)$$

Здесь мы ввели по аналогии с (7.4) оператор функции Грина \hat{g}_E , действие которого на любую функцию $Q(q)$ определено интегралом в (7.10) и определением (7.7) ядра интегрального оператора.

Введение бесконечно малой мнимой добавки $i\gamma$ к энергии потребовалось нам, как и раньше, для того, чтобы обеспечить асимптотику функций в координатном представлении, соответствующую расходящейся волне. Кроме того, с введением этой добавки приобретает определенный смысл целый ряд важных сингулярных интегралов.

Именно, пользуясь представлением (7.7), можно вычислить действие функции Грина на собственную функцию $\varphi_k^{(+)}(q)$ оператора энергии:

$$g_E \varphi_k^{(+)}[q] \equiv \int g(q, q', E) \varphi_k^{(+)}(q') dq' = \frac{\varphi_k^{(+)}(q)}{\varepsilon_k - (E + i\gamma)}. \quad (7.11)$$

При $\gamma = 0$ эти интегралы теряли бы смысл при $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \varepsilon_k$, и в результате этого мы не могли бы пользоваться системой функций $\varphi_{n, l, m}$, $\varphi_k^{(+)}$ для разложения по ним других функций. С введением $\gamma \neq 0$ эти трудности снимаются, так как становится ясным определение закона предельного перехода. Например,

$$\lim_{\gamma \rightarrow +0} (i\gamma \hat{g}_E \varphi_k^{(+)}[q]) = \frac{i\gamma \varphi_k^{(+)}(q)}{\varepsilon_k - (E + i\gamma)} \rightarrow \begin{cases} -\varphi_k^{(+)}(q) & \text{при } E = \varepsilon_k, \\ 0 & \text{при } E \neq \varepsilon_k. \end{cases} \quad (7.12)$$

Имея в виду соотношения такого типа, удобно ввести для оператора функции Грина \hat{g}_E символическое выражение

$$\hat{g}_E = \frac{1}{\hbar_0 + \hat{v} - (E + i\gamma)}. \quad (7.13)$$

При этом подразумевается, что при действии на любую собственную функцию φ_ε оператора $(\hbar_0 + \hat{v})$: $(\hbar_0 + \hat{v})\varphi_\varepsilon = \varepsilon\varphi_\varepsilon$ надо заменить оператор в знаменателе (7.13) его собственным значением:

$$\hat{g}_E \varphi_\varepsilon[q] = \frac{1}{(\hbar_0 + \hat{v}) - (E + i\gamma)} \varphi_\varepsilon[q] = \frac{1}{\varepsilon - (E + i\gamma)} \varphi_\varepsilon(q). \quad (7.14)$$

При пользовании символикой (7.13) мы гарантированы от всяких недоразумений, так как результат действия оператора (7.13) на функцию φ_ε всегда конечен в случае эрмитова потенциала U . Действительно, у эрмитова гамильтониана $(\hbar_0 + \hat{v})$ все собственные значения ε действительны, и при $\gamma \neq 0$ знаменатель в (7.14) никогда нулю не равен. Поэтому, не боясь впасть в противоречия, с операторным выражением типа (7.13) можно производить различные арифметические опера-

ции. При этом надо только следить за порядком действия операторов.

Вычислим в качестве примера разность гриновских функций $g(q, q', E)$ и $g^{(0)}(q, q', E)$ операторов $(\hbar_0 + \hat{v} - E)$ и $(\hbar_0 - E)$:

$$\begin{aligned} \hat{g}_E - \hat{g}_E^{(0)} &= (\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma)^{-1} - (\hbar_0 - E - i\gamma)^{-1} \equiv \\ &\equiv (\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma)^{-1} (\hbar_0 - E - i\gamma) (\hbar_0 - E - i\gamma)^{-1} - \\ &- (\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma)^{-1} (\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma) (\hbar_0 - E - i\gamma)^{-1} \equiv \\ &\equiv (\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma)^{-1} [(\hbar_0 - E - i\gamma) - \\ &- (\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma)] (\hbar_0 - E - i\gamma)^{-1} \equiv \\ &\equiv -(\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma)^{-1} \hat{v} (\hbar_0 - E - i\gamma)^{-1} \equiv -\hat{g}_E \hat{v} \hat{g}_E^{(0)}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

По-другому группируя члены, можно получить альтернативное выражение

$$\hat{g}_E - \hat{g}_E^{(0)} = -\hat{g}_E^{(0)} \hat{v} \hat{g}_E. \quad (7.15')$$

Входящий в эти формулы оператор $\hat{g}_E^{(0)}$ функций Грина свободного гамильтониана $(\hbar_0 - E)$ имеет простое аналитическое выражение. Функции свободного движения в импульсном представлении имеют вид (см. формулу (6.9))

$$\varphi_k^{(0)}(q) = \delta(k - q)$$

и из (7.7) получаем в случае свободного движения

$$g^{(0)}(q, q', E) = \int dk \frac{\delta(k - q) \delta(k - q')}{\varepsilon_k - (E + i\gamma)} = \frac{\delta(q - q')}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)}, \quad (7.16)$$

где $\varepsilon_q \equiv \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$. Результат действия оператора $\hat{g}_E^{(0)}$ свободной функции Грина на произвольную функцию $Q(q)$ сводится поэтому к умножению функции на $(\varepsilon_q - (E + i\gamma))^{-1}$:

$$\hat{g}_E^{(0)} Q[q] = \int \frac{\delta(q - q')}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)} Q(q') dq' = \frac{Q(q)}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)}. \quad (7.17)$$

Это, конечно, находится в полном соответствии с (7.13) и (7.14).

Соотношения (7.15) или (7.15') с известными $\hat{\sigma}$ и $\hat{g}_E^{(0)}$ могут рассматриваться как уравнения для функции Грина \hat{g}_E :

$$\hat{g}_E = \hat{g}_E^{(0)} - \hat{g}_E^{(0)} \hat{\sigma} \hat{g}_E, \quad (7.18a)$$

$$\hat{g}_E = \hat{g}_E^{(0)} - \hat{g}_E \hat{\sigma} \hat{g}_E^{(0)}. \quad (7.18б)$$

Тут же надо сказать, что для функции Грина \hat{g}_E можно написать бесчисленное количество уравнений типа (7.18). Действительно, пусть нам известна ф. Г. $\hat{g}_E^{(1)}$ у.Ш. с потенциалом $\hat{\sigma}_1$

$$\hat{g}_E^{(1)} = \frac{1}{\hbar_0 + \hat{\sigma}_1 - (E + i\gamma)},$$

и мы хотим выразить \hat{g}_E через $\hat{g}_E^{(1)}$. Составим разность $\hat{g}_E - \hat{g}_E^{(1)}$. Произведя тождественные алгебраические преобразования того же типа, что и в формуле (7.15), получим для \hat{g}_E уравнения

$$\hat{g}_E = \hat{g}_E^{(1)} - \hat{g}_E^{(1)} (\hat{\sigma} - \hat{\sigma}_1) \hat{g}_E, \quad (7.18в)$$

$$\hat{g}_E = \hat{g}_E^{(1)} - \hat{g}_E (\hat{\sigma} - \hat{\sigma}_1) \hat{g}_E^{(1)}. \quad (7.18г)$$

Если $\hat{\sigma}_1 \equiv 0$, получаем, естественно, уже известные нам уравнения (7.18а, б). Пользуясь данными в начале этого параграфа правилами, все эти уравнения для функции Грина можно расписать более детально. Например, уравнения (18а) и (18в) в подробной записи имеют вид

$$g(q, q', E) = \frac{\delta(q - q')}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)} - \frac{1}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)} \int U(q - q'') g(q'', q', E) dq'',$$

$$g(q, q', E) = g^{(1)}(q, q', E) - \int g^{(1)}(q, q'', E) \times \\ \times [U(q'' - q''') - U_1(q'' - q''')] g(q''', q', E) dq'' dq'''.$$

В такой записи эти уравнения могут быть, конечно, получены и из исходных аналитических выражений и уравнений (7.7) и (7.8) без обращения к операторной символике. Использование операторной символики — это лишь удобный технический прием, позволяющий упро-

стить запись и унифицировать вид формул. В простых случаях без этого приема можно легко обойтись, но в более сложных ситуациях, а с ними мы еще встретимся ниже, он сильно упрощает жизнь.

§ 8. Оператор рассеяния

В предыдущих параграфах мы видели, что для построения функции Грина у.Ш. необходимо знать очень много об этом уравнении: все собственные значения и все собственные функции. При этом существенно, что вся эта информация нигде по дороге не теряется. Она вся содержится в функциях Грина. Именно это и обуславливает мощь метода функции Грина. Именно поэтому мы можем считать в принципе решенной любую квантомеханическую задачу, если известна функция Грина соответствующего у.Ш. Рассмотрим с этой точки зрения функцию Грина $g(q, q', E)$ у.Ш. в импульсном представлении.

Как видно из формулы (7.7), особенно просто извлекать из функции Грина информацию о связанных состояниях системы (дискретный спектр). Именно, рассматриваемая как функция энергии E , функция $g(q, q', E)$ имеет полюса при отрицательных E в точках расположения связанных состояний: $E = \varepsilon_{n,l} < 0$. Вычеты ф. Г. в этих точках непосредственно дают нам уже нормированные волновые функции связанных состояний.

Действительно,

$$\lim_{E \rightarrow \varepsilon_{n,l}} [(E - \varepsilon_{nl}) g(q, q', E)] = \sum_m \varphi_{n,l,m}(q) \varphi_{n,l,m}^*(q'). \quad (8.1)$$

Зависимость волновых функций $\varphi_{n,l,m}$ от m известна:

$$\varphi_{n,l,m}(q) = \varphi_{n,l}(q) Y_{l,m}\left(\frac{q}{q}\right),$$

и входящая в правую часть (8.1) сумма легко вычисляется:

$$\sum_{m=-l}^l \varphi_{n,l}(q) \varphi_{n,l}^*(q') Y_{lm}\left(\frac{q}{q}\right) Y_{l,m}^*\left(\frac{q'}{q'}\right) = \\ = \frac{2l+1}{4\pi} P_l\left(\frac{qq'}{qq'}\right) \varphi_{nl}(q) \varphi_{nl}(q'),$$

где P_l — обычный полином Лежандра. Используя тот факт, что q и q' в (8.1) произвольны, легко далее найти и «радиальную» часть $\varphi_{n,l}(q)$.

Несколько сложнее обстоит дело с непрерывным спектром. В этом случае любое положительное значение энергии является разрешенным, и надо определить волновую функцию. Из предыдущих параграфов известен общий вид волновых функций непрерывного спектра:

$$\varphi_k^{(+)}(q) = \delta(k - q) - \frac{t(q, k, E)}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)} \equiv \varphi_k^{(0)}(q) + \delta\varphi_k(q), \quad (8.2)$$

где $\varphi_k^{(0)}$ — функция свободного движения с волновым вектором k , а $\delta\varphi_k$ — отличие функции $\varphi_k^{(+)}$ от $\varphi_k^{(0)}(q)$.

Задание величины и направления вектора k фиксирует (вместе с условием излучения $\gamma > 0$) граничные условия задачи о рассеянии: направление, скорость и величину потока частиц, падающего на рассеиватель из бесконечности. Отличие волновой функции $\varphi_k^{(+)}$ от функции свободного движения $\varphi_k^{(0)}$ учитывается в (8.2) членом $\delta\varphi_k$. Общий вид этого члена можем найти из исходного у. Ш.:

$$(\hbar_0 + \hat{v} - E)(\varphi_k^{(0)} + \delta\varphi_k) = 0,$$

т. е.

$$\delta\varphi_k(q) = -\hat{g}_E \hat{v} \varphi_k^{(0)}[q], \quad (8.3)$$

и, таким образом,

$$\begin{aligned} \varphi_k^{(+)}(q) &= \varphi_k^{(0)}(q) - \hat{g}_E \hat{v} \varphi_k^{(0)}[q] = \left[1 - (\hbar_0 + \hat{v} - E - i\gamma)^{-1} \hat{v} \right] \varphi_k^{(0)} \equiv \\ &\equiv \hat{g}_E (\hbar_0 - E - i\gamma) \varphi_k^{(0)} = -i\gamma \hat{g}_E \varphi_k^{(0)}[q]. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Здесь мы воспользовались тем обстоятельством, что $\varphi_k^{(0)}$ — это решение свободного у. Ш. и

$$(\hbar_0 - E) \varphi_k^{(0)} = 0.$$

Формула (8.4) в принципе решает поставленную выше задачу об определении волновой функции*) не-

*) Отметим тесное сходство и связь (8.4) с формулами (7.11) и (7.12).

прерывного спектра $\varphi_k^{(+)}$ по функции Грина \hat{g}_E . Практическое вычисление входящего в (8.4) предела

$$\varphi_k^{(+)}(q) = -i \lim_{\gamma \rightarrow +0} [\gamma \hat{g}_E \varphi_k^{(0)}[q]] = -i \lim_{\gamma \rightarrow +0} [\gamma g(q, k, E)]$$

является, однако, отнюдь не простым делом. Поэтому можно сказать, что хотя функция Грина и содержит всю информацию о волновых функциях непрерывного спектра, но извлечь эту информацию не просто: она запрятана слишком глубоко в структуру функции Грина.

Во всех сколько-нибудь сложных случаях, как, например, в задачах о движении нескольких взаимодействующих друг с другом частиц (см. гл. X), это обстоятельство оказывается неудобным, так как окончательные формулы, в которые входят функции Грина, не допускают наглядной физической интерпретации. Поэтому широкое распространение получил так называемый оператор рассеяния, который содержит столь же полную информацию, как и функция Грина, причем эта информация содержится в нем в, так сказать, «готовом для употребления» виде.

Наиболее простой способ введения оператора рассеяния заключается в следующем. Когда в § 6 рассматривался общий вид волновой функции $\varphi_k^{(+)}$, описывающей в импульсном представлении задачу о рассеянии, выяснилось, что величина $t(q, k, E)$ в формуле (6.12) прямо связана с амплитудой рассеяния и, таким образом, $|t|^2$ при $q = k = \sqrt{2mE}/\hbar$ прямо выражается через наблюдаемую на опыте величину — сечение рассеяния:

$$|t(q, k, E)|_{q^2=k^2=2mE/\hbar^2}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \right)^2 \sigma(\theta). \quad (8.5)$$

Было показано далее, что величина $t(q, k, E)$ подчиняется уравнению, следующему из у. Ш.:

$$t(q, k, E) = U(q - k) -$$

$$- \int U(q - q') \frac{\delta(q' - q'')}{\varepsilon_{q'} - (E + i\gamma)} t(q'', k, E) dq' dq''. \quad (8.6)$$

Величина $t(q, k, E)$ зависит от переменной импульсного представления q , а вектор k и скаляр E — это

параметры, связанные с граничными условиями задачи: \mathbf{k} — волновой вектор падающих на рассеиватель частиц, а E — их энергия: $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}}$.

Можно, однако, формально разорвать связь между \mathbf{k} и E и считать, что \mathbf{k} в (8.6) представляет собой, как и \mathbf{q} , произвольный вектор с $0 \leq k \leq \infty$. При этом полное число аргументов функции t оказывается в точности таким же, как и у функции Грина $g(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$: два вектора \mathbf{q} и \mathbf{k} и один скаляр E . Так как при таком расширении уравнения (8.6) \mathbf{k} можно рассматривать как импульсную переменную, то оказывается возможным ввести соответствующий функции $t(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E)$ оператор рассеяния \hat{t}_E , определив результат его действия на произвольную функцию $Q(\mathbf{q})$ равенством

$$\hat{t}_E Q[\mathbf{q}] \equiv \int t(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) Q(\mathbf{q}') d\mathbf{q}'. \quad (8.7)$$

Пользуясь введенными в предыдущем параграфе правилами операторной алгебры, напомним, исходя из (8.6), уравнение для оператора \hat{t}_E . Оно, очевидно, имеет вид

$$\hat{t}_E = \hat{\psi} - \hat{\psi} \hat{g}_E^{(0)} \hat{t}_E. \quad (8.8)$$

Смысл этого уравнения заключается в том, что результат действия правой и левой частей в (8.8) на произвольную функцию Q один и тот же:

$$\hat{t}_E Q[\mathbf{q}] = \{\hat{\psi} - \hat{\psi} \hat{g}_E^{(0)} \hat{t}_E\} Q[\mathbf{q}].$$

Для оператора рассеяния может быть написан целый ряд соотношений, устанавливающих его связь с функцией Грина. Убедимся прежде всего, что решение уравнения (8.8) имеет вид

$$\hat{t}_E = \hat{\psi} - \hat{\psi} \hat{g}_E \hat{\psi}. \quad (8.9)$$

Для проверки подставим это выражение в правую часть (8.8). Получим

$$\begin{aligned} \hat{\psi} - \hat{\psi} \hat{g}_E^{(0)} \hat{t}_E &= \hat{\psi} \{1 - \hat{g}_E^{(0)} (\hat{\psi} - \hat{\psi} \hat{g}_E \hat{\psi})\} = \\ &= \hat{\psi} - \hat{\psi} (\hat{g}_E^{(0)} - \hat{g}_E^{(0)} \hat{\psi} \hat{g}_E) \hat{\psi} = \hat{\psi} - \hat{\psi} \hat{g}_E \hat{\psi} = \hat{t}_E. \end{aligned}$$

Здесь мы использовали уравнение для функции Грина (7.18a).

Другие соотношения получим, умножая в операторном виде формулу (8.9) на $\hat{g}_E^{(0)}$ справа или слева:

$$\hat{t}_E \hat{g}_E^{(0)} = \hat{\psi} (1 - \hat{g}_E \hat{\psi}) \hat{g}_E^{(0)} = \hat{\psi} (\hat{g}_E^{(0)} - \hat{g}_E \hat{\psi} \hat{g}_E^{(0)}) = \hat{\psi} \hat{g}_E. \quad (8.10)$$

Здесь использовано уравнение (7.18b). Аналогичным образом получается формула

$$\hat{g}_E^{(0)} \hat{t}_E = \hat{g}_E \hat{\psi}. \quad (8.11)$$

С помощью этих формул и полученных ранее уравнений для функции Грина легко выразить функцию Грина через \hat{t} :

$$\hat{g}_E = \hat{g}_E^{(0)} - \hat{g}_E^{(0)} \hat{\psi} \hat{g}_E = \hat{g}_E^{(0)} - \hat{g}_E^{(0)} \hat{t}_E \hat{g}_E^{(0)}. \quad (8.12)$$

Соотношения (8.9) — (8.12), устанавливающие взаимно однозначное соответствие между операторами \hat{t}_E и \hat{g}_E , показывают, что количество информации, заключенное в этих операторах, одинаково. Извлекать же ее из \hat{t}_E много проще, так как волновые функции непрерывного спектра прямо выражаются через ядро $t(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E)$ оператора \hat{t}_E

$$\varphi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{q}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \frac{t(\mathbf{q}, \mathbf{k}, E)}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - (E + i\gamma)}.$$

В применении к отысканию энергий и волновых функций связанных состояний операторы \hat{t} и \hat{g} равноценны. Действительно, из формулы (8.9) и из выражения для функции Грина (см. (7.7)) получается следующее обобщенное выражение для ядра оператора \hat{t}_E :

$$\begin{aligned} t(\mathbf{q}, \mathbf{q}', E) &= U(\mathbf{q} - \mathbf{q}') - \sum_{n, l, m} \frac{(\hat{\psi} \varphi_{n, l, m}[\mathbf{q}])(\hat{\psi} \varphi_{n, l, m}[\mathbf{q}'])^*}{\varepsilon_{n, l} - (E + i\gamma)} - \\ &- \int d\lambda \frac{(\hat{\psi} \varphi_{\lambda}^{(+)}[\mathbf{q}])(\hat{\psi} \varphi_{\lambda}^{(+)}[\mathbf{q}'])^*}{\varepsilon_{\lambda} - (E + i\gamma)}. \quad (8.13) \end{aligned}$$

(Здесь использована также действительность потенциала $U(\mathbf{r})$, благодаря которой $U^*(\mathbf{q}) = U(-\mathbf{q})$.) Как видно из написанного выше выражения, функция

$t(q, q', E)$ имеет полюса в точках связанных состояний $E = \varepsilon_{n, l} < 0$, а вычеты в полюсах позволяют определить величины $\hat{\varphi}_{n, l, m}[q]$; зная последние, легко уже восстановить и нормированные волновые функции, связанных состояний, так как из у. Ш. следует, что

$$\hat{\varphi}_{n, l, m}[q] = (\varepsilon_{n, l} - \varepsilon_q) \varphi_{n, l, m}(q). \quad (8.14)$$

Прежде чем закончить этот параграф, сделаем еще одно замечание. Хотя операторное уравнение (8.8) очень похоже на уравнение (8.6), отличие между ними есть. Заключается оно в том, что k и E в (8.6) жестко связаны условием $E = \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, тогда как в уравнении (8.8) никаких ограничений на оба векторных аргумента функции $t(q, q', E)$ нет. Поэтому операторное уравнение (8.8) является более общим, чем уравнение (8.6) и эквивалентное ему у. Ш. (см. § 6). Проявляется это, в частности, в том, что из волновой функции $\varphi_k^{(+)}$ можно получить величину $t(q, k, E)$ при $E = \varepsilon_k$, тогда как для вычисления $t(q, q', E)$ при произвольных значениях q и q' нужна более полная информация.

Докажем эти утверждения. Подставляя волновую функцию в у. Ш., получаем

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E \right) \left[\delta(k - q) - \frac{t(q, k, E)}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - (E + i\gamma)} \right] + \hat{\varphi}_k^{(+)}[q] = 0,$$

что при $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \varepsilon_k$ дает

$$t(q, k, \varepsilon_k) = \hat{\varphi}_k^{(+)}[q]. \quad (8.15)$$

Этим доказано первое утверждение. Чтобы доказать второе, достаточно воспользоваться общим представлением для ядра оператора \hat{t}_E (8.13). Подставив в него (8.15), имеем

$$t(q, q', E) = U(q - q') - \sum_{n, l, m} \frac{(\hat{\varphi}_{n, l, m}[q]) (\hat{\varphi}_{n, l, m}[q'])^*}{\varepsilon_{n, l} - (E + i\gamma)} - \int d\lambda \frac{t(q, \lambda, \varepsilon_\lambda) t^*(q', \lambda, \varepsilon_\lambda)}{\varepsilon_\lambda - (E + i\gamma)}. \quad (8.16)$$

Здесь, как и в предыдущих параграфах, $\varepsilon_\lambda \equiv \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}$. Из только что приведенной формулы следует, что для построения функции $t(q, q', E)$ с $E \neq \varepsilon_q, \varepsilon_{q'}$ требуется знать решения у. Ш. при всех энергиях.

§ 9. Формулы для точечных потенциалов

Для иллюстрации того, как действуют общие формулы предыдущих параграфов, рассмотрим с их помощью свойства точечных потенциалов — сингулярных потенциалов с нулевым радиусом действия. Такие потенциалы часто используются в практических расчетах.

Рассмотрим сначала потенциал с малым, но конечным радиусом действия r_0 :

$$U(r) = \begin{cases} u(r), & r \leq r_0, \\ 0, & r > r_0. \end{cases} \quad (9.1)$$

Выполним для него все расчеты, а в конечных формулах устремим r_0 к нулю. Используем два обстоятельства.

1. Чем меньше радиус r_0 , тем труднее частице с орбитальным моментом $l \neq 0$ проникнуть в область действия потенциала из-за наличия отталкивающего центробежного барьера. Вероятность найти частицу с конечным значением энергии E и $l \neq 0$ в точке $r = 0$ вообще равна нулю. Таким образом, в состояниях с $l \neq 0$ точечный потенциал фактически не действует, и поэтому при стремлении радиуса потенциала к нулю нам достаточно рассмотреть случай $l = 0$.

2. Эффективность потенциала определяется не только его величиной, но и радиусом его действия. При уменьшении r_0 уменьшается область действия потенциала $U(r)$ и падает его эффективность. Для компенсации приходится одновременно с уменьшением r_0 увеличивать абсолютную величину потенциала. Ниже мы увидим, что условие сохранения эффективности потенциала при уменьшении его радиуса имеет вид

$$\lim_{r_0 \rightarrow 0} \int_0^{r_0} r U(r) dr = \text{const}, \quad (9.2)$$

т. е. при уменьшении r_0 абсолютная величина потенциала должна расти как r_0^{-2} (см. § 2 гл. I). В уравнение Шредингера для радиальной волновой функции $\chi(r)$ при $r \leq r_0$ (мы уже учли, что $l=0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi'' + (u(r) - E) \chi = 0. \quad (9.3)$$

Энергия частицы E входит в виде суммы с потенциалом. Последний, однако, при $r_0 \rightarrow 0$ надо в силу (9.2) считать бесконечно большим по абсолютной величине и, следовательно, членом с энергией в (9.3) можно пренебречь:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi'' + u(r) \chi = 0. \quad (9.3')$$

Решение этого уравнения можно записать в виде

$$\chi(r) = A \chi^{(0)}(r), \quad (9.4)$$

где A — постоянная, а функция $\chi^{(0)}(r)$ зависит только от вида потенциала $u(r)$. Будем нормировать эту функцию условием

$$\chi^{(0)}(r_0) = 1. \quad (9.5)$$

При такой нормировке вполне определенное значение имеет интеграл (ср. с (9.2))

$$\int_0^{r_0} \chi^{(0)}(r) \cdot u(r) r dr = -\frac{\hbar^2}{2m}. \quad (9.6)$$

Чтобы убедиться в справедливости этого равенства, достаточно помножить уравнение (9.3') на r и проинтегрировать по dr , учтя при этом (9.5) и то, что при $r_0 \rightarrow 0$ имеем цепочку равенств

$$\int_0^{r_0} r \chi^{(0)'} dr = r \chi^{(0)'} \Big|_0^{r_0} - \chi^{(0)} \Big|_0^{r_0} \xrightarrow{r_0 \rightarrow 0} -\chi^{(0)}(r_0) = -1.$$

Мы увидим немного ниже, что все свойства точечного потенциала характеризуются единственным параметром

ром — величиной производной функции $\chi^{(0)}(r)$ при $r=r_0$. Обозначим ее через $-\frac{1}{\alpha}$:

$$\frac{d}{dr} \chi^{(0)} \Big|_{r=r_0} = -\frac{1}{\alpha}. \quad (9.7)$$

Свяжем величину α , которая называется длиной рассеяния, с наблюдаемыми величинами. При положительной энергии и $l=0$ нормированная на $\delta(k-k_1)$ радиальная волновая функция имеет в области $r > r_0$ вид

$$\chi_k(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta).$$

Сшивая ее при $r=r_0$ с функцией (9.4) и используя (9.5) и (9.7), получаем при $kr_0 \rightarrow 0$

$$k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{\alpha}, \quad (9.8)$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \delta. \quad (9.8')$$

Таким образом, радиальная волновая функция непрерывного спектра имеет вид

$$\chi_{k0}(r) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \delta \cdot \chi^{(0)}(r), & r \leq r_0, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta) & r \geq r_0, \end{cases} \quad (9.9)$$

где фаза рассеяния δ связана с длиной рассеяния α соотношением (9.8).

При отрицательных энергиях E радиальная волновая функция при $r \geq r_0$ обязана иметь вид

$$\chi(r) = B e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Сшивая это решение с функцией (9.4), находим условие существования решения, соответствующего связанному состоянию:

$$\kappa = \frac{1}{\alpha}, \quad B = A. \quad (9.10)$$

Так как κ по определению положительна, то, как видно из (9.10), связанное состояние существует только при положительной длине рассеяния. При этом соответствующее собственное значение энергии равно

$$\varepsilon_0 = -\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}. \quad (9.11)$$

Из условия нормировки получаем, учитывая, что область $r \leq r_0$ дает исчезающе малый вклад в нормировочный интеграл:

$$\int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr = B^2 \int_0^\infty e^{-2\kappa r} dr = 1, \quad \text{т. е.} \quad B = \sqrt{2\kappa}.$$

Окончательно получаем для радиальной волновой функции связанного состояния

$$\chi_{\text{св}}(r) = \begin{cases} \sqrt{2\kappa} \chi^{(0)}(r), & r \leq r_0, \\ \sqrt{2\kappa} e^{-\kappa r}, & r \geq r_0. \end{cases} \quad (9.12)$$

Из предыдущего параграфа мы знаем, что оператор рассеяния \hat{T}_E , содержащий в себе полную информацию о потенциале, целиком определяется величинами $\hat{U}\psi_{n,l,m}$ и $\hat{U}\psi_k^{(+)}$, т. е. фактически поведением волновой функции внутри области действия потенциала.

Приведенные выше формулы позволяют нам в общем виде вычислить эти величины для точечных потенциалов. Действительно, воспользовавшись формулами § 6 для связи между импульсным и координатным представлением, получаем

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}\varphi_k^{(+)}[q] &= \int U(q-q') \varphi_k^{(+)}(q') dq' = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-iq'r} U(r) \psi_k^{(+)}(r) dr. \end{aligned} \quad (9.13)$$

Область интегрирования по dr здесь ограничена радиусом действия потенциала r_0 . Поэтому можно заменить

экспоненту $e^{-iq'r}$ единицей, а в разложении волновой функции по l

$$\psi_k^{(+)}(r) = \frac{1}{4\pi k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_{l0}\left(\frac{kr}{r}\right) i^l e^{i\delta_l} \frac{1}{r} \chi_{kl}(r)$$

удержать только член с $l=0$. В результате получаем, используя (9.9) и (9.6):

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}\varphi_k^{(+)}[q] &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\delta_0} \frac{1}{k} \int_0^{r_0} ru(r) \chi_{k_0}(r) dr = \\ &= \frac{e^{i\delta} \sin \delta}{2\pi^2 k} \int_0^{r_0} u(r) \chi^{(0)}(r) r dr = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2\pi^2} \frac{e^{i\delta} \sin \delta}{k}. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Учтя далее вытекающие из (9.8) равенства

$$\cos \delta = \frac{1}{\sqrt{1+(ak)^2}}, \quad \sin \delta = -\frac{ak}{\sqrt{1+(ak)^2}},$$

приводим (9.14) к виду

$$\hat{\sigma}\varphi_k^{(+)}[q] = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \frac{\alpha}{1+i\alpha k}. \quad (9.15)$$

Если длина рассеяния a положительна, то существует одно связанное состояние с радиальной функцией $\chi_{\text{св}}(r)$ (см. (9.12)). Произведя для него аналогичный расчет, находим

$$\hat{\sigma}\varphi_{000}[q] = \frac{\sqrt{8\pi\kappa}}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{r_0} u(r) \chi^{(0)}(r) dr = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\sqrt{\kappa}}{\pi}. \quad (9.16)$$

Теперь уже у нас есть все, чтобы с помощью формул (8.13) получить выражение для ядра $t(q, q', E)$ оператора рассеяния. В рассматриваемом нами случае точечного потенциала первый член в (8.13) — фурье-компонента потенциала — тождественно обращается в нуль:

$$\begin{aligned} |U(q-q')| &= \frac{1}{(2\pi)^3} \left| \int u(r) e^{-i(q-q')r} dr \right| < \\ &< \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{r_0} u(r) r^2 dr < \frac{r_0}{2\pi^2} \int_0^{r_0} u(r) r dr \xrightarrow{r_0 \rightarrow 0} 0. \end{aligned}$$

Вклад в $t(q, q', E)$ от непрерывного спектра легко вычисляется:

$$\begin{aligned} & - \int d\lambda \frac{(\partial\varphi_{\lambda}^{(+)}[q])(\partial\varphi_{\lambda}^{(+)}[q'])^*}{\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m} - (E + i\gamma)} = \\ & = - \left(\frac{\hbar^2\alpha}{4\pi^2m}\right)^2 4\pi \int_0^{\infty} d\lambda \frac{\lambda^2}{(1 + \alpha^2\lambda^2) \left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m} - (E + i\gamma)\right)} = \\ & = - \frac{\hbar^2}{4\pi^2m} \frac{|\alpha|}{1 - i|\alpha|k}, \end{aligned} \quad (9.17)$$

где $k \equiv \sqrt{\frac{2m(E + i\gamma)}{\hbar^2}}$. При положительном α , когда существует связанное состояние, оно также дает вклад в $t(q, q', E)$ (см. (9.16)).

$$- \frac{(\partial\varphi_{000}[q])(\partial\varphi_{000}[q'])^*}{\varepsilon_0 - (E + i\gamma)} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\alpha}{\pi^2(1 + \alpha^2k^2)}. \quad (9.17')$$

Собирая вместе (9.17) и (9.17'), получаем

$$t(q, q', E) = \frac{\hbar^2}{4\pi^2m} \frac{\alpha}{1 + i\alpha k}. \quad (9.18)$$

При $\alpha < 0$, когда связанного состояния нет, вклад в $t(q, q', E)$ дает только непрерывный спектр (см. (9.17)). Учитывая, что в этом случае $\alpha = -|\alpha|$, снова приходим к формуле (9.18). Таким образом, оператор рассеяния \hat{t}_E определяется формулой (9.18) как при положительном, так и при отрицательном значениях длины рассеяния α . Основное отличие этих двух случаев заключается в том, что при $\alpha > 0$ выражение в правой части (9.18) имеет полюс при энергии $E = -\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}$, отвечающей связанному состоянию. При $\alpha < 0$ полюса нет.

Пользуясь полученным выше выражением для $t(q, q', E)$ и рецептами предыдущего параграфа, легко получить и остальные формулы для точечных потенциалов. Например, функция Грина для точечного по-

тенциала равна

$$\begin{aligned} g(q, q', E) &= \frac{\delta(q - q')}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)} - \frac{\hbar^2}{4\pi^2m} \frac{1}{\varepsilon_q - (E + i\gamma)} \times \\ & \times \frac{\alpha}{1 + i\alpha \sqrt{\frac{2m(E + i\gamma)}{\hbar^2}}} \frac{1}{\varepsilon_{q'} - (E + i\gamma)}. \end{aligned} \quad (9.19)$$

Здесь, как и выше, введено обозначение $\varepsilon_k \equiv \frac{\hbar^2k^2}{2m}$.

§ 10. Теория возмущений в непрерывном спектре

Некоторые задачи теории возмущений уже рассматривались в § 5, где использовалось координатное представление. Основное внимание там было уделено учету возмущений в дискретном спектре, и это не случайно. Дело в том, что теория возмущений для задач о рассеянии имеет наиболее простую и компактную форму не в координатном представлении, а в импульсном. Это связано с тем, что именно в импульсном представлении наиболее естественным образом получается оператор рассеяния \hat{t}_E , столь удобный при рассмотрении задач о рассеянии.

Рассмотрим сначала простейший вариант теории, когда весь потенциал \hat{U} рассматривается как возмущение. Способ построения ряда теории возмущений сводится при этом к повторным итерациям уравнения для оператора \hat{t}_E :

$$\hat{t}_E = \hat{v} - \hat{v}\hat{g}_E^{(0)}\hat{t}_E = \quad (10.1a)$$

$$= \hat{v} - \hat{v}\hat{g}_E^{(0)}(\hat{v} - \hat{v}\hat{g}_E^{(0)}\hat{t}_E) = \dots \quad (10.1b)$$

В первом приближении

$$\hat{t}_E \approx \hat{t}_E^{(1)} \equiv \hat{v} \quad \text{и} \quad t^{(1)}(q, k_0, E) \equiv U(q - k_0). \quad (10.2)$$

Подставляя $\hat{t}_E^{(1)}$ в правую часть (10.1a), получаем \hat{t}_E во втором приближении:

$$\begin{aligned} \hat{t}_E &\approx \hat{t}_E^{(1)} + \hat{t}_E^{(2)} = \hat{t}_E^{(1)} - \hat{v}\hat{g}_E^{(0)}\hat{v}, \\ t_E^{(2)}(q, k_0, E) &= - \int U(q - q_1) dq_1 g^{(0)}(q_1, q_2, E) dq_2 U(q_2 - k_0) = \\ &= - \int U(q - q_1) \frac{dq_1}{\varepsilon_{q_1} - (E + i\gamma)} U(q_1 - k_0). \end{aligned} \quad (10.3)$$

Здесь вектор \mathbf{k}_0 относится к падающему на рассеиватель пучку частиц и, как обычно, $\varepsilon_{q_1} \equiv \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$. Продолжая итерацию, находим \hat{t}_E в третьем порядке теории возмущений:

$$\hat{t}_E \approx \hat{t}_E^{(1)} + \hat{t}_E^{(2)} + \hat{t}_E^{(3)}, \quad \hat{t}_E^{(3)} = \hat{v} \hat{g}_E^{(0)} \hat{v} \hat{g}_E^{(0)} \hat{v},$$

$$t^{(3)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}_0, E) =$$

$$= \int U(\mathbf{q} - \mathbf{q}_2) \frac{d\mathbf{q}_2}{\varepsilon_{q_2} - (E + i\gamma)} U(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \frac{d\mathbf{q}_1}{\varepsilon_{q_1} - (E + i\gamma)} U(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}_0). \quad (10.4)$$

Совершенно ясно, как продолжать эту процедуру дальше:

$$\hat{t}_E = \sum_{n=1}^{\infty} \hat{t}_E^{(n)}, \quad \hat{t}_E^{(n)} = (-)^{n-1} \hat{v} (\hat{g}_E^{(0)} \hat{v})^{n-1}. \quad (10.5)$$

Член n -го порядка $\hat{t}_E^{(n)}$ в этом разложении содержит n операторов \hat{v} и $(n-1)$ операторов $\hat{g}_E^{(0)}$. В амплитуду рассеяния такой член дает вклад (см. (6.15))

$$\begin{aligned} f^{(n)}\left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{k}_0}{k k_0}\right) &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} t^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0, E) \Big|_{k=k_0} = \\ &= +\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} (-)^n \int U(\mathbf{k} - \mathbf{q}_{n-1}) \frac{d\mathbf{q}_{n-1}}{\varepsilon_{q_{n-1}} - (E + i\gamma)} U(\mathbf{q}_{n-1} - \mathbf{q}_{n-2}) \times \\ &\quad \times \frac{d\mathbf{q}_{n-2}}{\varepsilon_{q_{n-2}} - (E + i\gamma)} \dots \frac{d\mathbf{q}_1}{\varepsilon_{q_1} - (E + i\gamma)} U(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}_0), \\ f(\theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}, \quad \cos \theta = \frac{k k_0}{k k_0}. \end{aligned} \quad (10.6)$$

Вектор \mathbf{k} относится здесь к рассеянным частицам.

Формулы (10.5), (10.6) допускают простую физическую интерпретацию: падающая на рассеиватель частица может провзаимодействовать с ним любое число раз. Чем больше число n актов взаимодействия, тем в более высоком порядке возмущения этот процесс учитывается. В первом порядке теории $\hat{t}^{(1)} = \hat{v}$ и учитывается только однократное взаимодействие с потенциалом, в

результате которого начальный импульс частицы $\hbar\mathbf{k}_0$ изменяется и становится равным конечному импульсу $\hbar\mathbf{k}$:

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} U(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0). \quad (10.6a)$$

Во втором порядке теории возмущения учитываются уже акты двукратного взаимодействия. В амплитуду рассеяния они дают вклад:

$$f^{(2)}(\theta) = +\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int U(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1) \frac{d\mathbf{q}_1}{\varepsilon_{q_1} - (E + i\gamma)} U(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}_0). \quad (10.6b)$$

Падающая с импульсом $\hbar\mathbf{k}_0$ частица в результате первого взаимодействия с потенциалом приобретает импульс $\hbar\mathbf{q}_1$ (множитель $U(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}_0)$ в подынтегральном выражении (10.6b); свободно движется затем с этим импульсом до второго взаимодействия (множитель $(\varepsilon_{q_1} - (E + i\gamma))^{-1}$), а в результате второго взаимодействия (множитель $U(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k})$) приобретает конечный импульс $\hbar\mathbf{k}$ и уходит с этим импульсом на бесконечность. В промежутке между первым и последним взаимодействием частица может иметь произвольный импульс $\hbar\mathbf{q}_1$, чему соответствует интегрирование по $d\mathbf{q}_1$, в (10.6b), но ее энергия E остается фиксированной. Про такую ситуацию, когда нормальная связь между импульсом и энергией нарушается $E \neq \frac{\hbar^2 q_1^2}{2m} \equiv \varepsilon_{q_1}$, говорят, что частица

находится вне массовой поверхности. При этом имеется в виду, что физически осуществимому движению свободных частиц с массой m и кинетической энергией E в пространстве импульсов $\hbar\mathbf{q}$ соответствует поверхность (сфера), задаваемая уравнением $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$. Движение (распространение) свободной частицы, находящейся вне массовой поверхности описывается свободной ф. Г. $\hat{g}_E^{(0)}$, которой и соответствует множитель $(\varepsilon_{q_1} - (E + i\gamma))^{-1}$ в (10.6b). Этот множитель получил специальное название — пропагатор от английского propagate — распространяться.

Аналогично интерпретируются и остальные члены в разложении амплитуды рассеяния (10.6): члену $f^{(n)}$

n -го приближения соответствует n последовательных актов взаимодействия частицы с потенциалом. В результате первого акта (множитель $U(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}_0)$ в (10.6)) частица уходит с физической поверхности и движется с импульсом $\hbar\mathbf{q}_1$ и энергией E (пропатор $(\epsilon_{\mathbf{q}_1} - (E + i\gamma))^{-1}$) до второго акта взаимодействия (множитель $U(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)$), после чего опять движется свободно вне физической поверхности и так далее вплоть до последнего n -го акта взаимодействия (множитель $U(\mathbf{k} - \mathbf{q}_{n-1})$), в результате которого частица приобретает импульс $\hbar\mathbf{k}$ и, вернувшись таким образом на физическую поверхность, уходит с этим импульсом на бесконечность.

Аналогичную простую интерпретацию можно дать и ряду теории возмущений для задачи о рассеянии в координатном представлении. В этом случае удобнее исходить непосредственно из уравнения Шредингера в координатном представлении

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) - E\right)\psi = -W\psi. \quad (10.7)$$

Здесь $W(r)$ — возмущение. Будем искать решение уравнения (10.7) в виде

$$\psi = \psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r) + \varphi_{\mathbf{k}_0}(r), \quad (10.8)$$

где $\psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r)$ — решение невозмущенного уравнения, а $\varphi_{\mathbf{k}_0}(r)$ — малая добавка. Подставляя (10.8) в (10.7), получаем для $\varphi_{\mathbf{k}_0}$ уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U - E\right)\varphi_{\mathbf{k}_0} = -W(\psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)} + \varphi_{\mathbf{k}_0}). \quad (10.9)$$

С помощью функции Грина $G_E^{(+)}(r, r')$ запишем это уравнение в интегральной форме

$$\varphi_{\mathbf{k}_0}(r) = -\int dr G_E^{(+)}(r, r') W(\psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r') + \varphi_{\mathbf{k}_0}(r')). \quad (10.10)$$

Итерируя его, получаем ряд теории возмущений

$$\varphi_{\mathbf{k}_0}(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{\mathbf{k}_0}^{(n)}(r), \quad (10.11)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{k}_0}^{(n)}(r) = & (-)^n \int dr_1 \dots dr_n G_E^{(+)}(r, r_n) W(r_n) \times \\ & \times G_E^{(+)}(r_n, r_{n-1}) W(r_{n-1}) \times \dots \\ & \dots \times W(r_2) G_E^{(+)}(r_2, r_1) W(r_1) \psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r_1). \end{aligned} \quad (10.12)$$

Обычно интересуются лишь асимптотикой при $r \rightarrow \infty$. В этом случае, пользуясь формулой (2.13), находим

$$\varphi_{\mathbf{k}_0}(r) \sim \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0), \quad (10.13)$$

$$\begin{aligned} f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = & (-)^n \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int dr_1 \dots dr_n \psi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(r_n) W(r_n) G_E^{(+)}(r_n, r_{n-1}) \times \dots \\ & \dots \times W(r_2) G_E^{(+)}(r_2, r_1) W(r_1) \psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r_1), \end{aligned}$$

где $\mathbf{k} = \frac{r}{r} \mathbf{k}_0$.

Собирая вместе все формулы, получаем окончательное выражение для волновой функции

$$\begin{aligned} \psi(r) = \psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)} + \varphi_{\mathbf{k}_0} \sim & \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}_0 r} + \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} f^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) \right] + \\ & + \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0). \end{aligned} \quad (10.14)$$

Полная амплитуда рассеяния

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = f^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) + \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) \quad (10.15)$$

складывается из «невозмущенной» амплитуды $f^{(0)}$, учитывающей рассеяние на невозмущенном потенциале $U(r)$ в (10.7), а $f^{(n)}$ с $n = 1, 2, \dots$ — это добавки, возникающие при последовательном учете возмущения W . Поправка первого порядка имеет вид

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_0) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int dr_1 \psi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(r_1) W(r_1) \psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(r_1) \quad (10.16a)$$

и интерпретируется следующим образом: падающая на рассеиватель частица описывается невозмущенной функцией $\psi_{k_0}^{(+)}$. В точке r_1 частица взаимодействует с возмущением $W(r_1)$ и после этого уходит на бесконечность, двигаясь в невозмущенном потенциале $U(r)$. При этом в качестве волновой функции конечного состояния, как мы видим из (10.13), надо брать $\psi_k^{(-)}$, свойства которой обсуждались в § 3 гл. II.

Поправка к амплитуде во втором порядке теории возмущений учитывает акты двукратного взаимодействия с возмущающим потенциалом W :

$$f^{(2)}(k, k_0) = \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int dr_2 dr_1 \psi_k^{(-)*}(r_2) W(r_2) \times \\ \times G_E^{(+)}(r_2, r_1) W(r_1) \psi_{k_0}^{(+)}(r_1). \quad (10.166)$$

При этом частица взаимодействует с потенциалом в точках r_1 и r_2 ; до, между и после взаимодействий она движется в поле невозмущенного потенциала $U(r)$. Состояние падающей на рассеиватель частицы описывается волновой функцией начального состояния $\psi_{k_0}^{(+)}$, состояние частицы, уходящей от рассеивателя на бесконечность — волновой функцией конечного состояния $\psi_k^{(-)}$, а в промежутке между взаимодействиями с возмущающим полем W движение частицы от точки r_1 к точке r_2 описывается функцией Грина $G_E^{(+)}(r_2, r_1)$. Таким образом, роль пропагатора в координатном представлении играет функция Грина $G_E^{(+)}$.

Точно таким же образом интерпретируются и остальные члены в разложении амплитуды рассеяния в ряд по возмущению W .

§ 11. Сходимость ряда теории возмущений

Вопрос о применимости теории возмущений является довольно деликатным*). Мы рассмотрим лишь один его аспект, связанный с широко распространенным, но со-

*) Так, например, применение теории возмущений к атому водорода (за возмущение принимается весь кулоновский потенциал) дает во втором порядке конечное, но неверное значение энергии

вершено неправильным представлением об условиях применимости теории возмущений. Именно, часто считают, что если первое приближение теории возмущений много меньше нулевого, а второе приближение много меньше первого, то это означает, что ряд теории возмущений сходится, и можно ограничиться первыми членами ряда. В общем случае это неправильно, и мы продемонстрируем это сейчас на двух примерах.

В первом примере (Я. Б. Зельдович, 1960А) мы рассмотрим в импульсном представлении у.Ш. для частицы в поле потенциала специального вида

$$U(q, q') = \begin{cases} -C \frac{\hbar^2}{2m} & \text{при } |q|, |q'| < b, \\ 0 & \text{при } |q| \text{ или } |q'| > b. \end{cases} \quad (11.1)$$

Входящие сюда постоянные C и b будем считать стремящимися к разным пределам: $C \rightarrow 0$ и $b \rightarrow \infty$, но так, что остается неизменной величина

$$\frac{4\pi C b - 1}{2\pi^2 C} = \text{const.} \quad (11.2)$$

В координатном представлении формуле (11.1) соответствует потенциал сложного вида с радиусом действия $r_0 \sim 1/b \rightarrow 0$.

Сначала решим у.Ш. с взаимодействием (11.1) точно, а потом попробуем решить его с помощью теории возмущений.

Введя обозначение $k^2 = 2mE/\hbar^2$, запишем у.Ш. в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m} (q^2 - k^2) \varphi(q) = - \int U(q, q') \varphi(q') dq'. \quad (11.3)$$

(Е. Вигнер, 1954; Р. Трис, 1956). При наличии же связанных состояний ряд теории возмущений начиная с некоторой энергии может расходиться. Эту трудность удается иногда преодолеть при использовании иных методов, например метода Фредгольма (Р. Йост, А. Пайс, 1951; М. Бейкер, 1958; И. Маннинг, 1964) или метода квазичастиц (С. Вейнберг, 1963). В случае же сильно сингулярного потенциала отталкивания ряд теории возмущений расходится, в то время как правильный ответ конечен. Не исключено, что такого рода ситуация может иметь место в так называемых неперенормируемых теориях квантованных полей (Н. Хури, А. Пайс, 1964; А. Пайс, Т. Ву, 1964; Б. А. Арбузов, А. Т. Филиппов, 1964).

Если нас интересует задача о связанном состоянии (т. е. $k^2 = -|k|^2 \equiv -\kappa^2$; $\kappa > 0$), то, выбирая решение в виде

$$\varphi(q) = \begin{cases} \frac{A}{q^2 + \kappa^2}, & q \leq b, \\ 0, & q > b \end{cases} \quad (11.4)$$

и подставляя его в уравнение, получаем после элементарного интегрирования

$$0 = 1 - 4\pi C \int_0^b \frac{q_1^2 dq_1}{q_1^2 + \kappa^2} = \\ = 1 - 4\pi C \left[b - \kappa \operatorname{arctg} \frac{b}{\kappa} \right]_{b \rightarrow \infty} \rightarrow 1 - 4\pi C \left[b - \frac{\pi \kappa}{2} \right]. \quad (11.5)$$

Отсюда находим энергию связи уровня

$$-e_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad \kappa = \frac{4\pi C b - 1}{2\pi^2 C}. \quad (11.6)$$

До сих пор мы считали константы b и C конечными. Из (11.6) видно, однако, что энергия связанного состояния (11.6) будет оставаться постоянной при предельном переходе $b \rightarrow \infty$, $C \rightarrow 0$, если выполняется условие (11.2). Другими словами, если мы хотим, чтобы во время предельного перехода оставалась неизменной энергия уровня, величина b должна стремиться к бесконечности как

$$\frac{1 + 2\pi^2 \kappa C}{4\pi C}. \quad (11.7)$$

Это условие вполне аналогично условию, которое мы получили в координатном представлении для точечных потенциалов (см. § 3 гл. I).

От функции (11.4) просто перейти к координатному представлению:

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{iqr} \varphi(q) dq = A \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{e^{-\kappa r}}{r}. \quad (11.8)$$

Полученный результат можно было предвидеть. Волновая функция (11.8) в том виде, как она записана, расходится в нуле, как это и должно быть в случае сингулярного потенциала.

Рассмотрим теперь задачу о рассеянии. Волновую функцию будем искать в виде

$$\varphi_k(q) = \delta(k - q) + \frac{B}{q^2 - (k^2 + i\gamma)}, \quad (11.9)$$

где γ — бесконечно малая положительная величина.

В предыдущих параграфах было показано, что такой вид действительно соответствует задаче о рассеянии: первый член при переходе к координатному представлению дает плоскую волну, а второй — расходящуюся рассеянную. Подставляя (11.9) в исходное уравнение и учитывая (11.1) и тождество

$$\frac{1}{q^2 - (k^2 + i\gamma)} = \frac{1}{q^2} + \frac{k^2 + i\gamma}{q^2 (q^2 - k^2 - i\gamma)}, \quad (11.10)$$

сводим уравнение к

$$0 = B - C \left\{ 1 + 4\pi B \int_0^b \frac{q^2 dq}{q^2 - (k^2 + i\gamma)} \right\} \equiv \\ \equiv B - C \left\{ 1 + 4\pi B \left(b + \frac{\pi i k}{2} \right) \right\}.$$

Используя (11.6), перепишем это как

$$B = \frac{i}{2\pi^2} \frac{1}{k - i\kappa},$$

что и решает задачу о нахождении волновой функции.

Переходя к координатному представлению, получаем

$$\psi_k(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{ikr} + \frac{i}{k - i\kappa} \frac{e^{ikr}}{r} \right\}. \quad (11.11)$$

Сечение рассеяния при этом равно

$$\sigma = \frac{4\pi}{\kappa^2} \frac{\kappa^2}{\kappa^2 + k^2}. \quad (11.12)$$

Попробуем теперь эту же задачу о сингулярном потенциале решить с помощью теории возмущений. На первый взгляд это должно быть очень просто, так как матричные элементы взаимодействия $V_{qq'}$ стремятся к нулю при $C \rightarrow 0$.

Процедура теории возмущений сводится к итерации исходного уравнения (11.3). Невозмущенная волновая функция (т. е. решение этого уравнения без правой части) есть просто плоская волна:

$$\varphi_k^{(0)}(q) = \delta(k - q).$$

Поправка первого приближения равна (см. предыдущий параграф)

$$\varphi_k^{(1)}(q) = \frac{-V_{qk}}{q^2 - k^2 - i\gamma} = \begin{cases} \frac{C}{q^2 - k^2 - i\gamma} & \text{при } q < b, \\ 0 & \text{при } q > b. \end{cases}$$

Подставляя это выражение в правую часть (11.3), находим

$$\varphi_k^{(2)}(q) = \frac{C}{q^2 - k^2 - i\gamma} 4\pi C \left(b + \frac{i\pi k}{2} \right).$$

Продолжая итерации, получаем

$$\varphi_k^{(n)}(q) = \frac{C}{q^2 - k^2 - i\gamma} \left[4\pi C \left(b + \frac{i\pi k}{2} \right) \right]^{n-1}. \quad (11.13)$$

Чтобы получить, наконец, точное значение волновой функции, надо просуммировать весь бесконечный ряд теории возмущений, что в нашем случае легко делается, так как ряд сводится к геометрической прогрессии:

$$\begin{aligned} \varphi_k(q) &= \delta(k - q) + \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_k^{(n)}(q) = \\ &= \delta(k - q) + \frac{C}{q^2 - k^2 - i\gamma} \frac{1}{1 - 4\pi C \left(b + \frac{i\pi k}{2} \right)} = \\ &= \delta(k - q) + \frac{i}{2\pi^2 (k - i\kappa)} \frac{1}{q^2 - k^2 - i\gamma}, \end{aligned} \quad (11.14)$$

что совпадает с полученной выше точной формулой.

Мы видели в предыдущих абзацах, что каждое приближение теории возмущений обращается в нуль в пределе $C \rightarrow 0$, т. е. при стремлении радиуса потенциала к нулю. Ответ, являющийся суммой бесконечного ряда, тем не менее отличен от нуля и зависит не от радиуса потенциала, а лишь от энергии связанного состояния.

Это служит наглядным доказательством того, что малость первого и последующих членов теории возмущений еще не гарантирует возможности ограничиться конечным числом приближений. Причина довольно проста: критерий применимости теории возмущений заключается в том, чтобы добавка к волновой функции $\delta\varphi(q)$ была много меньше функции нулевого приближения при всех значениях аргумента.

В рассмотренном в этом параграфе случае, например, функция нулевого приближения $\varphi_k^{(0)}(q)$ равна нулю при $k \neq q$. Поправки же $\varphi_k^{(n)}(q)$ отличны от нуля практически при всех q , хотя по абсолютной величине они и стремятся к нулю. Это и приводит к тому, что любое конечное число приближений не может дать правильный ответ для волновой функции.

В рассмотренных выше случаях предполагалось, как это обычно и делается, что при достаточно слабом возмущении λW ($\lambda \rightarrow 0$) волновая функция ψ и возмущенная энергия E могут быть разложены в степенной ряд по λ , или, иначе говоря, предполагалось, что эти величины аналитичны по λ .

Это, однако, не всегда так. Сейчас мы приведем простой пример, когда энергия E является неаналитической функцией величины λ . Пусть $\varphi_0, \dots, \varphi_N$ и $E_0 = 0, \dots, E_N$ — собственные функции и собственные значения невозмущенного гамильтониана

$$H_0\varphi_0 = E_0\varphi_0, \quad H_0\varphi_n = E_n\varphi_n, \quad n = 1, \dots, N,$$

причем значения E_n распределены равномерно на интервале $(-\Delta, \Delta)$. Пусть также гамильтониан возмущения имеет отличные от нуля матричные элементы лишь между состояниями 0 и n , причем знак всех элементов одинаков. Предположим, наконец, для упрощения расчета, что все матричные элементы равны друг другу, $V_{0n} = V$.

Решение у. Ш.

$$(E - H_0)\psi = V\psi$$

ищем в виде

$$\psi = A \left(\varphi_0 + \sum_{n=1}^N c_n \varphi_n \right). \quad (11.15)$$

При этом не предполагаем, что $c_n \ll 1$. Для этих коэффициентов немедленно получаем уравнения

$$E = V \sum_{n=1}^N c_n, \quad (E - E_n) c_n = V. \quad (11.16)$$

Находя c_n из второго уравнения и подставляя это значение в первое уравнение, получаем

$$E = f(E) = V^2 \sum_{n=1}^N \frac{1}{E - E_n}. \quad (11.17)$$

Это есть точное уравнение для определения энергии E . Из рис. 13 видно, что уравнение имеет $(N-1)$ корень

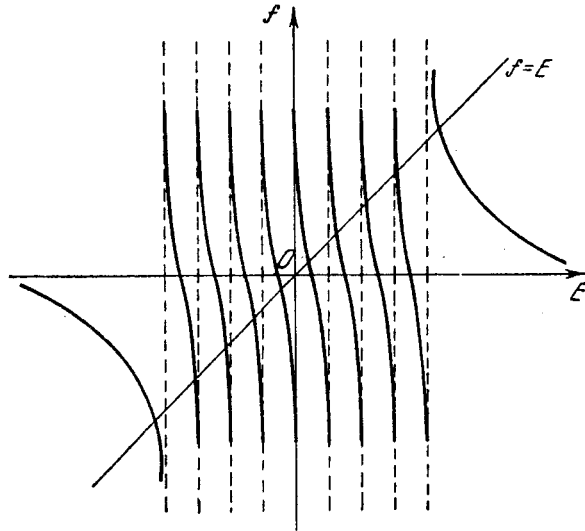


Рис. 13.

на интервале $[-\Delta, \Delta]$, один корень при $E > \Delta$ и один корень при $E < -\Delta$.

Найдем теперь в пределе $N \rightarrow \infty$ энергию основного состояния (корень уравнения при $E < -\Delta$). В этом случае мы можем заменить сумму интегралом, после чего получаем

$$\frac{E}{\Delta} = -\frac{NV^2}{2\Delta^2} \ln \frac{E - \Delta}{E + \Delta}. \quad (11.18)$$

Мы получили трансцендентное уравнение для определения E . Заметим, что для того, чтобы эффективная связь осталась слабой (именно этот случай мы и рассмотрим), необходимо, чтобы при $N \rightarrow \infty$ $V \rightarrow 0$ так, чтобы коэффициент при логарифме стремился к малому числу, т. е. $\frac{NV^2}{2\Delta^2} \rightarrow \alpha \ll 1$. В этом случае $E \approx -\Delta$, и мы получаем

$$E + \Delta = -2\Delta e^{-\frac{1}{\alpha}}, \quad \alpha = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{NV^2}{2\Delta^2} \ll 1. \quad (11.19)$$

Мы получили формулу для энергии основного состояния, которая неаналитически зависит от силы возмущения V и потому по теории возмущений не может быть получена. Заметим, что в нашем случае расстояние между уровнями на интервале $[-\Delta, \Delta]$ имеет порядок $2\Delta/N$ и потому стремится к нулю при $N \rightarrow \infty$, тогда как расстояние между нижним уровнем и следующим за

ним уровнем конечно и равно $\Delta_1 = E + \Delta = -2\Delta e^{-\frac{1}{\alpha}}$. Мы получили так называемую энергетическую щель, а на интервале $[-\Delta, \Delta]$ сплошной спектр. Заметим еще, что вероятность A^2 нахождения состояния ψ_0 в основном состоянии ψ_0 в нашем случае конечна:

$$A^2 \approx \frac{2}{\alpha} e^{-\frac{1}{\alpha}}. \quad (11.20)$$

Рассмотренная выше модель могла показаться довольно искусственной, не имеющей никакого отношения к реально встречающимся проблемам.

Подчеркнем в этой связи, что она может рассматриваться как модель (правда, очень грубая) сверхпроводящего состояния. При этом роль функций φ_n играют состояния φ_k пары электронов с противоположно направленными импульсами k и $-k$ и спинами (куперовские пары (Л. Купер, 1956)), а величину 2Δ можно интерпретировать как ширину размытия поверхности Ферми (это та область, в которой происходит взаимодействие, ответственное за сверхпроводимость). Взаимодействие между различными состояниями в этой модели возникает за счет перехода в промежуточное состояние ψ_0 и

носит характер эффективного притяжения. Такая модель качественно передает характерные черты сверхпроводящего состояния: возникновение щели при сколь угодно слабом притяжении и неаналитическую зависимость ширины щели от силы взаимодействия (Дж. Бардин, Л. Купер, Дж. Шриффер, 1957; Н. Н. Боголюбов, 1958).

§ 12. Временная функция Грина

Рассмотрим неоднородное временное у. Ш.

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H) \varphi(\mathbf{r}, t) = Q(\mathbf{r}, t). \quad (12.1)$$

Частное решение этого уравнения можно записать как

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' dt' G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') Q(\mathbf{r}', t'). \quad (12.2)$$

Входящая сюда временная ф. Г. равна

$$G = -\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-\frac{iE(t-t')}{\hbar}}. \quad (12.3)$$

Действительно, учитывая, что

$$HG_E = EG_E + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

легко получаем

$$\begin{aligned} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H) G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-\frac{iE(t-t')}{\hbar}} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (12.4)$$

Формула (12.3) еще неоднозначна, так как в нее можно подставлять $G_E^{(+)}$ или $G_E^{(-)}$.

Как скоро будет видно, наибольший интерес представляет первая возможность (т. е. $G_E^{(+)}$). Она описывает естественное развитие событий от прошедшего к будущему. Именно этот случай мы и рассмотрим.

Пользуясь явным выражением для $G^{(+)}$, можем написать

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dE e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \int dp \frac{\psi_p^{(+)}(\mathbf{r}) \psi_p^{(+)*}(\mathbf{r}')}{E - \left(\frac{\hbar^2 p^2}{2m} - i\gamma\right)}.$$

При этом предполагается, что связанных состояний нет. Их учет не прибавил бы ничего нового. Проинтегрировав по E и помня, что $\gamma > 0$, сразу же получаем

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= \\ &= \begin{cases} -\frac{i}{\hbar} \int dp \psi_p^{(+)}(\mathbf{r}) \psi_p^{(+)*}(\mathbf{r}') e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2 p^2}{2m} (t-t')} & \text{при } t > t', \\ 0 & \text{при } t < t', \end{cases} \end{aligned} \quad (12.5)$$

т. е. эта функция отлична от нуля только при $t > t'$.

Наиболее простой вид, конечно, имеет гриновская функция свободного у. Ш. С помощью формул (2.3) — (2.5) ее можно записать в любом из видов:

$$\begin{aligned} G_0^{(+)}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &= -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t')} \right)^{3/2} e^{i \frac{m(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{2\hbar(t-t')}} = \\ &= -\frac{m}{4\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{\frac{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| - i \frac{E}{\hbar} (t-t')}{|r-r'|}}. \end{aligned} \quad (12.6)$$

Решение свободного уравнения с источником $Q(\mathbf{r}, t)$ запишется как

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = -\frac{m}{4\pi^2 \hbar^3} \int dE d\mathbf{r}' dt' Q(\mathbf{r}', t') \frac{e^{\frac{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| - i \frac{E}{\hbar} (t-t')}{|r-r'|}}}{|r-r'|}. \quad (12.7)$$

Смысл этой формулы кристально ясен: значение волновой функции в точке \mathbf{r} в момент времени t является суперпозицией сходящихся к этой точке волн

$$\frac{e^{\frac{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| - i \frac{E}{\hbar} (t-t')}{|r-r'|}}}{|r-r'|},$$

вышедших из точки \mathbf{r}' в момент времени t' . Амплитуда этих волн определяется плотностью источника $Q(\mathbf{r}', t')$.

В простейшем случае, когда точечный источник расположен в начале координат и испускание происходит в момент времени $t' = 0$ ($Q = \delta(r')\delta(t')$), имеем

$$\varphi(r, t) = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} e^{i(kr - \frac{Et}{\hbar})}, \quad (12.8)$$

где

$$k = \frac{m}{\hbar} \frac{r}{t}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Испусканию частиц с фиксированной энергией ε отвечает экспоненциальная зависимость плотности источника от времени:

$$Q(r, t) = \tilde{Q}(r) e^{\frac{-i\varepsilon t}{\hbar}}. \quad (12.9)$$

Действительно, в этом случае интегрирование по t' и E в (12.7) выполняется сразу, и мы получаем

$$\varphi(r, t) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int dr' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\kappa|r-r'| - \frac{i\varepsilon t}{\hbar}}}{|r-r'|} Q(r'), \quad (12.10)$$

где $\kappa = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$. Если \tilde{Q} отлична от нуля лишь в малой области пространства вокруг точки r' , то при больших r получаем естественный результат:

$$\varphi(r, t) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\kappa r - \frac{i\varepsilon t}{\hbar}}}{r} \int dr' e^{i\kappa \frac{r}{r'} r'} \tilde{Q}(r'). \quad (12.11)$$

Но это есть не что иное, как расходящаяся волна частиц с энергией ε . Амплитуда ее есть фурье-компонента по функции источника.

Другой ф. Г., явный вид которой известен, является ф. Г. для гармонического осциллятора ($U = \frac{m\omega^2 r^2}{2}$)

$$G(r, t; r', t') = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t-t')} \right)^{3/2} e^{\frac{iS(r, t; r', t')}{\hbar}}, \quad (12.12)$$

где

$$S(r, t; r', t') = \frac{m\omega}{2 \sin \omega(t-t')} [\cos \omega(t-t')(r^2 + r'^2) - 2rr']. \quad (12.13)$$

Интересно отметить, что $S(r, t; r', t')$ (так же как и показатель экспоненты в (12.6)) есть классическое действие, т. е.

$$S(r, t; r', t') = \int_{t'}^t L(t) dt,$$

где $L = T - U$ — лагранжиан системы, а интегрирование производится по классической траектории частицы. Этот факт не случаен, а связан с квазиклассичностью движения в потенциале $U(r)$, зависящем от координат только линейной и квадратично (Р. Фейнман, 1948). Потенциал U при этом может являться произвольной функцией времени: $U = U(r, t)$.

ГЛАВА V

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

§ 1. Волновая функция в квазиклассическом приближении

Квазиклассическое приближение, или метод ВКБ, для простейшего случая одномерного движения с потенциалом, не зависящим от времени, широко используется в квантовой механике. Этот метод излагается в настоящем параграфе весьма кратко, поскольку он подробно разобран во многих учебниках. В следующих параграфах рассмотрены более сложные вопросы квазиклассики. § 2 посвящен рассмотрению квазиклассических формул для вырожденного ферми-газа. На этом примере мы увидим, что усреднение по большому числу частиц приближает систему к классической. В § 3 излагается квазиклассический метод для многомерного случая; полученные при этом формулы, в частности условия квантования Бора — Зоммерфельда, игравшие столь важную роль в старой квантовой теории (М. Борн, 1925), оказываются применимыми и в том случае, когда переменные в уравнении Шредингера не разделяются. Наконец, в § 4 рассмотрено квазиклассическое приближение для нестационарных задач и получена формула для проницаемости потенциального барьера, переменного во времени. Эта формула используется для решения задачи об ионизации атома в поле сильной световой волны.

Рассмотрим сначала качественный характер решений одномерного у. Ш. (1.6) гл. I с потенциалом, не зависящим от времени. При этом необходимо отдельно рассмотреть области, где

$$k^2 < V(r) \text{ и } k^2 > V(r).$$

В первой области полная энергия меньше, чем потенциальная, во второй — больше. Кинетическая энергия при этом соответственно отрицательна или положительна.

При изучении поведения $\chi_k(r)$ мы воспользуемся так называемым квазиклассическим приближением*), которое достаточно хорошо передает качественные черты различных случаев.

Прежде всего перепишем уравнение (1.6) гл. I в виде

$$\chi_k'' + \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \chi_k = 0, \quad (1.1)$$

где p совпадает с классическим импульсом частицы:

$$p = \hbar \sqrt{k^2 - V(r)}.$$

Будем искать решение уравнения (1.1) в виде

$$\chi(r) = e^{i\sigma(r)}. \quad (1.2)$$

Для $\sigma(r)$ получаем

$$i\sigma'' - (\sigma')^2 + \frac{p^2}{\hbar^2} = 0.$$

Если (как мы и будем предполагать) $\sigma = \sigma_0 + \sigma_1 + \dots$, $\sigma_1 \ll \sigma_0$, это уравнение дает

$$\sigma_0' = \pm \frac{p(r)}{\hbar}, \quad \sigma_0 = \pm \frac{1}{\hbar} \int^r p(r') dr', \quad \sigma_1 = \frac{i}{2} \ln \frac{p}{p_0}, \quad (1.3)$$

откуда

$$\chi = \sqrt{\frac{p_0}{p}} \exp \left\{ \pm \frac{i}{\hbar} \int^r p(r') dr' \right\}. \quad (1.4)$$

*) В квантовой механике это приближение было впервые использовано в работах Г. Венцеля (1926), Х. Крамерса (1926) и Л. Бриллюэна (1926) и потому часто называется приближением ВКБ. Именно в связи с необходимостью решения квантовомеханических задач и стал интенсивно разрабатываться квазиклассический метод, хотя отдельные задачи аналогичного типа рассматривались еще Ж. Лиувиллем (1837) и Рэлеем (1912) в связи с задачей пространства коротких волн (см. по этому поводу книгу Дж. Хединга (1962), в которой имеется библиография по данному вопросу; там же можно найти решение некоторых конкретных задач). Ряд математических вопросов, связанных с квазиклассическим приближением, рассмотрен в книге В. П. Маслова (1965).

Условием применимости описанного метода, очевидно, является

$$\left| \frac{\sigma''}{(\sigma')^2} \right| = \frac{p'\hbar}{p^2} = \left| \frac{d\lambda(r)}{dr} \right| \ll 1; \quad (1.5)$$

Здесь λ — длина волны частицы $\lambda(r) = \frac{\hbar}{p(r)}$. Это условие выполняется лишь для достаточно гладких потенциалов, вдали от тех точек, где $p(r)$ обращается в нуль (точек поворота). В случае реальных потенциалов условие (1.5) остается справедливым в широкой области изменения r .

В классически достижимой области $k^2 > V(r)$, т. е. $E > U(r)$ два независимых решения можно записать как

$$\sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r p(r') dr' \right\}, \quad \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r p(r') dr' \right\}, \quad (1.6)$$

т. е. оба решения имеют осциллирующий характер. Частота осцилляций тем выше, чем больше разность $k^2 - V(r)$.

Случай $k^2 < V(r)$ соответствует классически недостижимой области, где $E < U(r)$. В этой области p принимает мнимые значения $p = i|p|$ и в качестве двух независимых решений можно взять монотонные функции

$$\chi_1 = \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r |p(r')| dr' \right], \quad \chi_2 = \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r |p(r')| dr' \right]. \quad (1.7)$$

Таким образом, мы приходим к следующему заключению о характере волновых функций.

В классически допустимой области у. Ш. имеет два решения. Каждое из них имеет осцилляторный характер. Частота осцилляций тем больше, чем больше разность $k^2 - V(r)$.

В классически недопустимой области также имеются два решения. Оба они монотонны. Одно из них монотонно убывает от точки, где $k^2 = V(r)$, другое — монотонно возрастает.

Заметим, что выражение, стоящее в экспоненте в (1.4), это не что иное, как укороченное действие $\tilde{S} = \int_{r_0}^r p(r') dr'$. Учитывая зависимость волновой функции $\chi(r, t)$ от времени $\chi(r, t) = \chi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$ и выбирая для определенности в (1.4) знак плюс, получаем $\chi(r, t) \sim e^{\frac{i}{\hbar} S(r, t)}$, где величина $S(r, t) = \tilde{S}(r) - Et = \int L(t') dt'$ есть радиальная часть полного действия, $L = \frac{p^2}{2m} - U(r)$ — функция Лагранжа рассматриваемой системы. В более простом одномерном случае соответствующая формула имеет вид

$$\psi(x, t) \sim e^{\frac{iS(x, t)}{\hbar}}. \quad (1.8)$$

Эта формула имеет принципиальное значение, так как устанавливает связь между классической и квантовой механикой. В общем случае она является приближенной и справедлива при тех же условиях, что и квазиклассика. Как было показано Р. Фейнманом (1948) (см., например, книгу Р. Фейнмана, А. Хибса (1965)), точный квантовомеханический аналог формулы (1.8) можно получить, если ввести континуальное интегрирование, т. е. интегрирование по всем возможным траекториям частицы*).

В общем случае такой континуальный интеграл вычислен быть не может. Если, однако, выполнены условия применимости квазиклассики, то основной вклад в этот интеграл дает узкий пучок траекторий, близких к классической траектории. Учет вклада одной лишь классической траектории и дает формулу (1.8), которая, таким образом, является приближенной.

Однако в ряде простых случаев формула (1.8) становится точной (Р. Фейнман, 1948). Докажем, что это утверждение справедливо, если лагранжиан L является квадратичной формой от переменных x и p . Для этого во

*) Отметим еще работы Р. Фейнмана (1950), И. М. Гельфанда и И. М. Яглома (1956) и Л. Д. Фаддеева (1969), в которых можно найти дополнительный материал по данному вопросу.

временное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x, t) \psi \quad (1.9)$$

подставим

$$\psi(x, t) = A(x, t) e^{\frac{iS(x, t)}{\hbar}} \quad (1.10)$$

и учтем, что действие $S(x, t)$ удовлетворяет классическому уравнению Гамильтона — Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U(x, t) = 0. \quad (1.11)$$

Тогда получаем

$$i \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{A} \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{2i}{A} \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + i \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right). \quad (1.12)$$

Если $A(x, t)$ зависит лишь от t , то легко видеть, что (1.12) имеет следующее частное решение:

$$\left. \begin{aligned} S(x, t) &= a(t)x^2 + b(t)x + c(t), \\ A(t) &= \exp \left[-\frac{1}{m} \int_{t_0}^t a(t') dt' \right]. \end{aligned} \right\} \quad (1.13)$$

Здесь t_0 — произвольный момент времени (постоянная интегрирования). Из уравнений

$$H = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad p = \frac{\partial S}{\partial x}$$

находим общий вид гамильтониана, для которого справедлива формула (1.10) с $A \equiv A(t)$:

$$H(x, t) = \alpha_1(t)p^2 + \alpha_2(t)px + \alpha_3(t)x^2 + \beta_1(t)p + \beta_2(t)x + \gamma(t) \quad (1.14)$$

($\alpha_i, \beta_i, \gamma$ — произвольные функции времени). К этому случаю относятся:

- 1) свободная частица;
- 2) движение в однородном электромагнитном поле;
- 3) гармонический осциллятор с переменными массой и частотой под действием внешней силы, произвольно зависящей от времени.

Рассмотрим, в частности, частицу ($m = 1$), движущуюся в однородном электрическом поле $f(t)$, включаемом в момент t_0 . Через $\xi(t)$ и $\eta(t)$ обозначим положение и скорость частицы, начинающей движение с нулевыми начальными условиями:

$$\eta(t) = \int_{t_0}^t f(t') dt', \quad \xi(t) = \int_{t_0}^t \eta(t') dt'.$$

Найдем действие $S(x, t; x', t')$ ($t > t' > t_0$)

$$S(x, t; x', t') = \int_{t'}^t L(\tau) d\tau = \int_{t'}^t \left[\frac{1}{2} v^2(\tau) + f(\tau)x(\tau) \right] d\tau. \quad (1.15)$$

Здесь $x(\tau)$ и $v(\tau)$ — положение и скорость частицы, имеющей в момент t' координату x' :

$$\left. \begin{aligned} v(\tau) &= v' + \int_{t'}^{\tau} f(t') dt' = v' + \eta(\tau) - \eta(t'), \\ x(\tau) &= x' + (v' - \eta(t'))(\tau - t') + \xi(\tau) - \xi(t'). \end{aligned} \right\} \quad (1.16)$$

Величину v' определяем из условия $x(t) = x$, после чего $x(\tau)$ и $v(\tau)$ принимают окончательный вид:

$$\left. \begin{aligned} x(\tau) &= x' + \frac{(x - \xi(t)) - (x' - \xi(t'))}{t - t'} (\tau - t') + \\ &\quad + \xi(\tau) - \xi(t'), \\ v(\tau) &= \frac{(x - \xi(t)) - (x' - \xi(t'))}{t - t'} + \eta(\tau). \end{aligned} \right\} \quad (1.17)$$

Как нетрудно видеть, $x(t') = x'$, $x(t) = x$. Подставляя выражения (1.17) в (1.15), после несложных вычислений получаем

$$S(x, t; x', t') = \frac{[(x - \xi(t)) - (x' - \xi(t'))]^2}{2(t - t')} + \eta(t)x - \eta(t')x' - \frac{1}{2} \int_{t'}^t \eta^2(\tau) d\tau. \quad (1.18)$$

Сравнивая с (1.13), находим

$$a(t) = \frac{1}{2(t-t')}, \quad A(t) = \frac{\text{const}}{\sqrt{t-t'}}. \quad (1.19)$$

(Значение константы легко найти из сравнения с известной функцией Грина для свободного движения.) В итоге получаем формулу

$$G(x, t; x', t') = \frac{\theta(t-t')}{\sqrt{2\pi i(t-t')}} e^{\frac{iS(xt; x', t')}{\hbar}}, \quad (1.20)$$

где $S(xt; x', t')$ определено в (1.18).

Если $f(t) = F$ от времени не зависит, то (1.18) переходит в действие для движения в постоянном поле F :

$$S(x, t; x', t') = \frac{(x-x')^2}{2(t-t')} + \frac{F}{2}(x+x')(t-t') - \frac{F^2}{24}(t-t')^3. \quad (1.21)$$

Наконец, при $F \rightarrow 0$ получаем S для свободной частицы:

$$S(x, t; x', t') = \frac{(x-x')^2}{2(t-t')}. \quad (1.22)$$

Подставляя (1.21), (1.22) в формулу (1.20), получаем явные выражения для соответствующих функций Грина.

§ 2. Квазиклассическое приближение для вырожденного ферми-газа *)

Рассмотрим сначала одномерный случай. Пусть мы имеем потенциальный ящик длины l ($U = \infty$ при $x < 0$ и $x > l$; $U = 0$ при $0 \leq x \leq l$). Тогда волновая функция n -го стационарного состояния $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x$, а энергия $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{l^2}$. Поскольку в каждом квантовом состоянии могут находиться лишь две частицы спина $1/2$, то при заполнении такими частицами нашего ящика мы

*) В данном параграфе излагаются результаты работы Я. Б. Зельдовича и Е. М. Рабиновича (1959). Математически строгое обоснование этих результатов дано Э. Э. Шнолем (1970).

получаем следующее выражение для плотности частиц при температуре $T = 0$:

$$\rho_1^{(0)} = \frac{2n}{l} = \frac{2\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \sqrt{E_n}. \quad (2.1)$$

Поскольку полученное выражение не зависит от l , то можно устремить l к ∞ , т. е. перейти к рассмотрению системы в свободном пространстве. Поместим теперь эту систему в потенциальное поле $U(x)$. Тогда в квазиклассическом приближении получаем выражение для плотности, аналогичное (2.1):

$$\rho_1(x) = \frac{2\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \sqrt{E_n - U(x)}. \quad (2.2)$$

Для разности плотностей имеем

$$\Delta\rho_1(x) \equiv \rho_1(x) - \rho_1^{(0)} = \frac{2\sqrt{2m}}{\pi\hbar} [\sqrt{E_n - U(x)} - \sqrt{E_n}]. \quad (2.3)$$

В трехмерном случае соответствующие величины имеют вид:

$$\rho_3^{(0)} = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} (E_n)^{3/2}, \quad (2.1')$$

$$\rho_3(\mathbf{r}) = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} (E_n - U(\mathbf{r}))^{3/2}, \quad (2.2')$$

$$\Delta\rho_3(\mathbf{r}) = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} [(E_n - U(\mathbf{r}))^{3/2} - E_n^{3/2}]. \quad (2.3')$$

Возникает вопрос о границах применимости этих формул. Представим себе случай $U(\mathbf{r})$, отрицательного в ограниченной области пространства и равного нулю всюду вне этой области. Тогда казалось бы для применимости формул необходимо, чтобы число частиц, связанных в яме, было много больше единицы. В одномерном случае при $|U(x)| \ll E_n$ находим

$$\Delta\rho_1(x) = -\frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \frac{U(x)}{\sqrt{E_n}}. \quad (2.4)$$

Итак, если $U(x) \leq 0$, то $\Delta\rho_1(x) > 0$, причем с увеличением E суммарное изменение плотности газа над ямой уменьшается. Смысл этого результата ясен: в одномерном случае яма всегда имеет по крайней мере один связанный

уровень с $E_0 < 0$, дающий положительный вклад в $\Delta\rho_1$. Свободные частицы с $E > 0$ пролетают над ямой быстрее, чем вне ямы, следовательно, плотность их над ямой меньше, чем вне ее. Поэтому величина $\Delta\rho_1$ есть разность вклада связанных частиц (не зависящего от E) и вклада свободных частиц с $E > 0$. Возникает вопрос: применимы ли формулы (2.3), (2.4) при одном связанном состоянии? Ответ на этот вопрос оказывается утвердительным: именно сейчас мы покажем, что обращение $\Delta\rho_1(x)$ в нуль при $E_n \rightarrow \infty$ справедливо независимо от применимости квазиклассического приближения при всех энергиях $E < E_n^*$). В частности, достаточно, чтобы квазиклассическое приближение было применимо при $E = E_n$. Для доказательства этого утверждения рассмотрим малое возмущение потенциала δU и найдем изменение $\psi_n(x)$ и $\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2$ в первом приближении теории возмущений. В одномерном случае, как известно, волновые функции можно выбрать действительными, после чего получаем

$$\delta\psi_n = \sum_m \frac{\delta U_{mn}}{E_n - E_m} \psi_m(x), \quad (2.5)$$

$$\delta\rho_n(x) = 2\psi_n \delta\psi_n = \sum_{m \neq n} A_{nm}, \quad (2.6)$$

где

$$A_{nm} = \frac{2\psi_n \psi_m \delta U_{mn}}{E_n - E_m}, \quad A_{nm} = -A_{mn}.$$

Рассмотрим суммарное изменение плотности частиц с $n < \nu$:

$$\delta\rho_1(n < \nu) = \sum_{n < \nu} \delta\rho_n = \sum_{n=1}^{\nu} \sum_{m \neq n} A_{nm}, \quad (2.7)$$

откуда находим

$$\delta\rho_1(n < \nu) + \delta\rho_1(n > \nu) = \sum_{m \neq n} A_{mn} = 0.$$

Иными словами,

$$\delta\rho_1(n < \nu) = -\delta\rho_1(n > \nu). \quad (2.8)$$

*) Это объясняется тем, что вклад в $\Delta\rho$ от связанного состояния почти полностью компенсируется вкладом в $\Delta\rho$ от состояний непрерывного спектра с малой энергией.

Поскольку это соотношение верно для произвольной малой вариации δU при произвольном (не малом) $U(x)$, то такое соотношение справедливо и для изменения $U(x)$ от 0 до $U(x)$, т. е.

$$\Delta\rho_1(n < \nu) = -\Delta\rho_1(n > \nu) = -\sum_{n=\nu}^{\infty} [\rho_{1n}(x) - \rho_{1n}^{(0)}]. \quad (2.9)$$

Смысл этого преобразования состоит в том, что с его помощью мы переходим к рассмотрению частиц с энергией больше граничной $E > E_n$, для которых условие квазиклассичности движения в поле $U(x)$ гораздо менее ограничительно.

Если оно выполнено, то волновые функции, нормированные на единичный объем, имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \psi_{k_0}(x) &= \sqrt{\frac{k_0}{k(x)}} \exp\left[i \int k dx\right], \\ k(x) &= \sqrt{k_0^2 - V(x)}, \quad V(x) = \frac{2m}{\hbar^2} U(x), \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

откуда находим

$$\rho_1(x) - \rho_1^{(0)} = -\frac{k - k_0}{k}, \quad (2.11)$$

$$\Delta\rho_1(k < k_n) = \frac{2}{\pi} \int_{k_n}^{\infty} \frac{k - k_0}{k} dk_0 = \frac{2}{\pi} (V k_n^2 - V - k_n), \quad (2.12)$$

что совпадает с формулой (2.3).

Для нахождения поправок к формулам (2.2), (2.3) возьмем более точное приближение для волновых функций:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{k_0} &= \sqrt{\frac{k_0}{k}} \exp\left[i \int k dx - i\sigma_2 - \sigma_3\right], \\ \sigma_2 &= \frac{k'}{4k^2} + \frac{1}{8} \int \frac{k'^2}{k^3} dx, \quad \sigma_3 = \frac{3}{16} \left(\frac{k'}{k^2}\right)^2 - \frac{k''}{8k^3}, \end{aligned} \right\} \quad (2.13)$$

откуда следует

$$\Delta\rho_1 = -\frac{2}{\pi} \int_{k_n}^{\infty} k_0 dk_0 \left[\frac{1}{k} - \frac{1}{k_0} - \frac{V''}{4k^5} - \frac{5V'^2}{8k^7} \right]. \quad (2.14)$$

Интегрируя, получаем ответ

$$\Delta\rho_1 = \frac{2}{\pi} \left[k_n(x) - k_n^{(0)} + \frac{V''}{12k_n^3(x)} + \frac{V'^2}{8k_n^5(x)} \right]. \quad (2.15)$$

Недостаток этого способа получения поправок заключается в том, что в выражении (2.13) для волновой функции мы пренебрегаем амплитудой отраженной волны (рассматриваем только деформацию проходящей волны), которая в случае аналитического $U(x)$, не имеющего особенностей на вещественной оси, не разлагается в ряд по $1/k$.

Другой подход к поправкам заключается в использовании борновского приближения. При произвольном по форме, но малом $U(x)$, используя свойство полноты системы волновых функций, получаем

$$\Delta\rho_1(x) = \int L(k_n | x - y |) V(y) dy, \quad (2.16)$$

где функция

$$L(x) = -\frac{2}{\pi} \int_{2x}^{\infty} \frac{\sin t}{t} dt$$

отлична от нуля в интервале порядка единицы и вне этого интервала быстро затухает.

Выражение (2.16) выявляет тот факт, что масштабом длины в решении является $\lambda_n = 1/k_n$ — длина волны частицы, движущейся с граничной энергией; между тем связанные частицы и частицы с малой энергией, на которые $U(x)$ действует особенно сильно, имеют $\lambda \gg \lambda_n$. Следовательно, их вклад взаимно компенсируется.

Размазывание, описываемое функцией $L(k_n | x - y |)$, не изменяет общего прироста числа частиц в окрестности области действия потенциала, поскольку после интегрирования получаем

$$\int \Delta\rho_1(x) dx = -\frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar\sqrt{E_n}} \int U(x) dx \quad (2.17)$$

в точном соответствии с (2.3).

Отступления от формулы (2.17) оказываются более высокого порядка по $U(x)$, тогда как отступления от локальной формулы (2.3) первого порядка по $U(x)$.

Вместе со старшим поправочным членом выражение (2.17) имеет вид (ср. (2.14))

$$\int \Delta\rho_1(x) dx = \frac{2\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \int [(E - U(x))^{1/2} - E^{1/2}] dx + bE^{-1/2} \int \left(\frac{dU}{dx}\right)^2 dx. \quad (2.18)$$

Следует иметь в виду, что эти формулы становятся неприменимыми при малом, но периодическом $U(x)$, $U(x) \sim \sin k_n x$: как известно, в этом случае спектр разбивается на зоны; совпадение границы зоны с граничной энергией ферми-распределения, существенно меняет свойства газа (в частности, превращает металл в диэлектрик).

Переходя к рассмотрению трехмерного случая, заметим, что при малом $U(\mathbf{r})$, локализованном в области $|\mathbf{r}| < R_0$, связанные состояния отсутствуют и борновское приближение применимо вплоть до самых низких энергий. По этой причине можно обойтись без использования теоремы полноты и интегрировать по занятым состояниям.

В результате получаем

$$\Delta\rho_3(\mathbf{r}) = k_n^4 \int L(k_n | \mathbf{r} - \mathbf{r}' |) V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (2.19)$$

где

$$L(x) = \frac{\sin(2x) - 2x \cos x}{4x^4}.$$

Разлагая $V(\mathbf{r}')$ в ряд по $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, приходим к известной формуле

$$\Delta\rho_3 = -\frac{1}{2\pi^2} \left(V k_n + \frac{\nabla^2 V}{12k_n} \right). \quad (2.20)$$

Хотя общий характер формулы сохраняется, существенным здесь является различие в знаке поправки: в одномерном случае коэффициент при $\nabla^2 V$ был положительным.

Рассмотрим еще случай трехмерного потенциала, не являющегося, однако, локализованным. Если потенциал зависит только от одной координаты, например $U = U(x)$,

то k_y и k_z — интегралы движения, и при фиксированных k_y и k_z задача сводится к одномерной

$$\Delta\rho_1(k_y, k_z, x) = \frac{2}{\pi} \left[\left(\frac{\sqrt{2m(E_x - U)}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar} \right) + \frac{V''}{12k_x^3} + \frac{V'^2}{8k_x^5} \right], \quad (2.21)$$

где

$$k_x = \sqrt{k_n^2 - k_y^2 - k_z^2}, \quad E_x = E_n - \frac{(k_y^2 + k_z^2)\hbar^2}{2m}.$$

Полное изменение плотности получается при интегрировании по k_y и k_z

$$\Delta\rho_3(k_n, x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{k_n} \Delta\rho_1(k_x, x) k_x dk_x. \quad (2.22)$$

Однако при подстановке в (2.22) квазиклассического выражения (2.21) для $\Delta\rho_1$ интеграл на нижнем пределе расходится. Для преодоления этой трудности разобьем область интегрирования на две области. При $k_x < k$ интегрируем точное (не квазиклассическое) выражение $\Delta\rho_1$. При $k_x > k$ пользуемся квазиклассическим выражением

$$\Delta\rho_3(k_n, x) = \Delta\rho_3(k, x) + \frac{1}{2\pi} \int_k^{k_n} \Delta\rho_1(k_x, x) k_x dk_x. \quad (2.23)$$

В пределе $k_n \rightarrow \infty$, $\Delta\rho_3$ должна удовлетворять статистической формуле без поправок, т. е.

$$\Delta\rho_3(k_n, x) \xrightarrow{k_n \rightarrow \infty} \Delta\rho_3^{(0)}(k_n, x) = \frac{1}{3\pi^2} [(k_n^2 - V)^{3/2} - k_n^3]. \quad (2.24)$$

Из сравнения этих двух выражений получаем, что для каждого из двух поправочных членов $\Delta\rho_1^{(i)}$ в (2.21) имеет место формула

$$\int_0^\infty \Delta\rho_1^{(i)}(k_x, x) k_x dk_x = 0, \quad (2.25)$$

откуда следует

$$\Delta\rho_3^{(i)}(k_n, x) = -\frac{1}{2\pi} \int_{k_n}^\infty \Delta\rho_1^{(i)}(k_x, x) k_x dk_x. \quad (2.26)$$

Эта формула несправедлива, однако, для основного статистического члена в (2.21). Таким образом, в трехмерном случае принцип перенесения суммирования из области $k < k_n$ в область $k > k_n$ применим только к поправкам к статистической формуле.

В заключение заметим, что рассмотренная нами величина $\rho(x)$ есть не что иное, как диагональный элемент матрицы плотности $\rho(x, x)$ при температуре $T = 0$, записанной в координатном представлении. Явный вид $\rho(x, x)$ для ряда случаев можно найти в работе Ю. Н. Демкова и И. В. Комарова (1965). Некоторые формулы для матрицы плотности ρ при температуре, отличной от нуля, имеются в работе С. Голдена (1957).

§ 3. Многомерный случай

При переходе к многомерному случаю сразу же выясняется, что обычный квазиклассический метод здесь применять нельзя. Поэтому обычно пытаются найти такую систему координат, в которой переменные в у. Ш. разделяются, и тем самым задача сводится к одномерной. В случае свободного движения, помимо сферической системы, переменные разделяются еще в десяти системах координат (Л. Эйзенхарт, 1934). Потенциалы, допускающие разделение переменных, перечислены в работе Л. Эйзенхарта (1948).

Многомерная квазиклассика для систем, не допускающих разделения переменных, была развита совсем недавно (Дж. Келлер, 1958; Дж. Келлер, С. Рубинов, 1960; В. П. Маслов, 1965). Ее построение оказалось не совсем тривиальным, поскольку выяснилось, что существенную роль при этом играют топологические свойства фазового пространства (Дж. Келлер, С. Рубинов, 1960; В. П. Маслов, 1965; В. И. Арнольд 1967).

Рассмотрим сначала, следуя работе Дж. Келлера (1958), вывод условий квантования для частицы, находя-

щейся в многомерной потенциальной яме. Обычно считают, что в квазиклассическом приближении $\psi = \psi_0$, где

$$\psi_0(q_i, t) = A(q_i, t) e^{iS(q_i, t)/\hbar}, \quad (3.1)$$

$S(q_i, t)$ — полное действие, а функция $A(q_i, t)$ является однозначной функцией координат. В силу непрерывности функции ψ_0 разность ΔS любых двух значений многозначной функции $S(q_i, t)$ равна

$$\Delta S = \oint_C p_i dq_i = 2\pi\hbar n. \quad (3.2)$$

Это уравнение должно выполняться для любой замкнутой кривой в q -пространстве. Однако все замкнутые кривые рассматривать не обязательно, поскольку интеграл в (3.2) имеет одно и то же значение для любых двух замкнутых кривых, которые могут быть деформированы друг в друга без пересечения сингулярности подынтегрального выражения. Например значение этого интеграла равно нулю для кривой, которая может быть деформирована в точку. Более подробно вопрос о выборе контура интегрирования обсуждается в тексте после формулы (3.9).

Мы пришли к условию квантования с целыми числами n . Это условие, однако, верно не всегда. Например, в случае одномерного осциллятора, как хорошо известно, n нужно заменить на $n + 1/2$. Отказываясь от предположения однозначности $A(q_i, t)$, вместо (3.2) получаем

$$\Delta S = \oint_C p_i dq_i = 2\pi\hbar \left(n + i \frac{\Delta \ln A}{2\pi} \right). \quad (3.3)$$

Если, например, два значения A отличаются знаком, то $\Delta \ln A = -i\pi$ и

$$\Delta S = \oint_C p_i dq_i = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.4)$$

Мы приходим, таким образом, к следующему обобщению формулы (3.1) для ψ_0 :

$$\psi_0 = \sum_k A_k(q, t) e^{iS_k(q, t)/\hbar}, \quad (3.5)$$

где S_k и A_k — различные ветви многозначных функций S и A .

Подставляя (3.5) в уравнение Шредингера $H(p, q)\psi_0 = E\psi_0$, получаем уравнения для S и A .

$$H\left(\frac{\partial S_k}{\partial q}, q\right) = E, \quad (3.6)$$

$$\sum_l \frac{\partial}{\partial q_l} (v_l P_k) = 0, \quad (3.7)$$

где $P_k = A_k^2$, $v_l = \frac{\partial H}{\partial p_l}$. Уравнение (3.6) есть обычное уравнение Гамильтона — Якоби. Уравнение (3.7) выражает сохранение «вероятности» $P_k = A_k^2$.

Из рассмотрения трубки траекторий с бесконечно малой площадью поперечного сечения $d\sigma$ находим *)

$$v P_k = v_0 \frac{d\sigma_0}{d\sigma} P_k(0), \quad (3.8)$$

где

$$v = \sqrt{\sum_l v_l^2}.$$

Уравнение (3.3) для A_k и S_k принимает теперь вид

$$\oint_C \nabla S_k ds = 2\pi\hbar \left(n + \frac{i}{2\pi} \oint_C \nabla \ln A_k ds \right), \quad (3.9)$$

причем уравнения (3.9) должны выполняться при интегрировании по произвольному контуру C в координатном пространстве. Если, однако, два таких контура C_1 и C_2 могут быть деформированы друг в друга без пересечения особых точек функций ∇S и $\nabla \ln A$ (назовем такие контуры эквивалентными), то интеграл по одному из них можно не рассматривать. Поэтому достаточно рассмотреть неэквивалентные друг другу контуры, которых оказывается конечное число. Очевидно, что это и есть число условий квантования.

*) Такой способ рассмотрения использовался уже в первой работе по квантовой теории рассеяния заряженной частицы кулоновским полем (В. Гордон, 1928).

Нахождение этих контуров усложняется из-за того факта, что функции ∇S и $\nabla \ln A$ в нашем пространстве являются не однозначными, а, скажем, M -значными (то обстоятельство, что степень неоднозначности функций ∇S и $\nabla \ln A$ одинакова, видно из уравнения (3.7)). Можно, однако (подобно тому как это делается в теории аналитических функций),шить M экземпляров нашего q -пространства и получить накрывающее пространство, на котором функции ∇S и $\nabla \ln A$ будут уже однозначны. Независимые замкнутые кривые в накрывающем пространстве и дают нужные нам контуры C_i .

Вычислим при обходе контура C_i изменение величины $\ln A - \Delta \ln A = \oint_{C_i} \nabla \ln A ds$.

Изменение величины $\ln A$ происходит в тех точках контура, где A обращается в ∞ . Из (3.8) видно, что это точки, в которых $\frac{d\sigma}{d\sigma_0} = 0$ или $v = 0$. Поверхность $\frac{d\sigma}{d\sigma_0} = 0$ — это каустическая поверхность, а поверхность $v = 0$ — это поверхность точек остановки. Как хорошо известно из теории дифракции (Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, 1967), при прохождении через простую каустику амплитуда A умножается на $e^{-i\pi/2} = -i$, а при прохождении через каустику порядка d — на $e^{-i d\pi/2}$ (говорят, что каустика имеет порядок d , если $\frac{d\sigma}{d\sigma_0} \rightarrow 0$ величина порядка малости d). Точно такой же фазовый множитель приобретает амплитуда и при прохождении через простую точку остановки (т. е. такую точку остановки, после прохождения которой лишь одна компонента импульса p меняет знак). Учитывая вклад всех особых точек на контуре C_i , мы приходим к обобщенным условиям квантования Бора — Зоммерфельда

$$\oint_{C_i} p_i dq_i = 2\pi\hbar \left(n_i + \frac{d_i}{4} \right), \quad (3.10)$$

причем эти условия справедливы и в тех случаях, когда переменные не разделяются, т. е. p_i зависит от всех q_i . Здесь $d_i = d_i^{(1)} + d_i^{(2)}$, $d_i^{(1)}$ — число точек пересечения кон-

тура C_i с каустикой, $d_i^{(2)}$ — число точек пересечения контура C_i с поверхностью точек остановки. При этом мы должны учитывать кратности этих точек.

Простейший пример использования этих формул относится к одномерному движению в потенциале типа потенциала осциллятора. В этом случае накрывающее пространство состоит из двух отрезков (q_1, q_2) (q_1 и q_2 — классические точки остановки) с отождествленными концами, т. е. является окружностью. Полагая в (3.10) $d_1 = 0$, $d_2 = 2$, получаем известное условие квантования

$$\oint p dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.11)$$

До сих пор мы рассматривали движение в гладком потенциале. Интересный случай, рассмотренный в работе Дж. Келлера и С. Рубинова (1960), — это свободное движение в области, ограниченной жесткими стенками.

Мы рассмотрим здесь кратко случай круга и эллипса. В обоих случаях задачу можно было бы решить методом разделения переменных. Метод Келлера и Рубинова позволяет, однако, не только более наглядно получить эти результаты, но и выявляет качественные закономерности, справедливые в общем случае, когда переменные не могут быть разделены.

Итак, пусть частица движется свободно в области D , ограниченной жесткими стенками B . Ее движение описывается уравнением

$$(\Delta + k^2)\psi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \psi = 0 \quad \text{на } B. \quad (3.12)$$

Аналогично предыдущему случаю решение ищем в виде

$$\psi = \sum_j A_j e^{ikS_j} + \dots \quad (3.13)$$

Подставляя это выражение для ψ в (3.12) и приравнявая коэффициенты при k^2 и k , получаем уравнения для S_j и A_j

$$(\nabla S_j)^2 = 1, \quad (3.14)$$

$$2\nabla S_j \cdot \nabla A_j + A_j \Delta S_j = 0. \quad (3.15)$$

Из (3.14) следует, что поверхность $S = \text{const}$ можно интерпретировать как поверхность волнового фронта. Соответственно лучи, являющиеся ортогональными траекториями к этим поверхностям, представляют собой прямые линии. Если s — длина пути вдоль луча, то из уравнения (3.15) следует:

$$A(s) = A(0) \left[\frac{\rho_1 \rho_2}{(\rho_1 + s)(\rho_2 + s)} \right]^{1/2}, \quad (3.16)$$

где ρ_1 и ρ_2 — главные кривизны волнового фронта при $s = 0$. Уравнение (3.16) выражает закон сохранения вероятности в бесконечно узкой лучевой трубке. Заметим, что для того, чтобы удовлетворить граничным условиям $\psi = 0$ на B , члены в (3.13) должны входить парами, причем на границе B

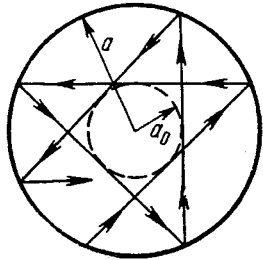


Рис. 14.

$$S_l = S_{l'}, \quad A = -A_{l'}, \quad \frac{\partial S_l}{\partial n} = -\frac{\partial S_{l'}}{\partial n}.$$

Теперь остается лишь повторить все рассуждения, относящиеся к случаю гладкого потенциала. При этом особыми поверхностями здесь являются каустики, при прохождении через которые фаза A меняется на $-\pi/2$, и граничная поверхность, после отражения от которой фаза A изменяется на $-\pi$.

Мы приходим, таким образом, к следующему обобщению условий квантования:

$$k \oint_{C_i} \nabla S ds = 2\pi \left(n + \frac{d}{4} + \frac{b}{2} \right). \quad (3.17)$$

Здесь d — число пересечений контура C_i с каустикой, b — число точек контура, общих с границей B .

Перейдем к рассмотрению конкретных примеров. Пусть сначала областью D является круг радиуса a . Рассмотрим какой-либо луч и все последующие его отражения от границы (рис. 14). Нетрудно видеть, что все они касаются окружности радиуса a_0 , которая является каустикой для такого рода лучей. При этом, однако, через каждую точку кругового кольца проходят

два луча такого рода. Рассмотрим поэтому два семейства лучей (рис. 15, а, б), каждое из которых полностью заполняет круговое кольцо, причем через каждую точку этого кольца проходит единственный луч из данного семейства*). (Такое семейство называется конгруэнцией.) При этом лучи первого семейства, отражаясь от границы, переходят в лучи второго семейства, а лучи

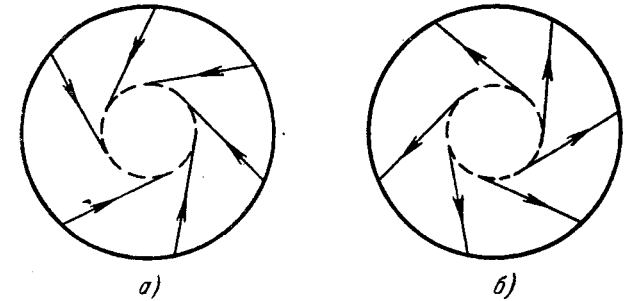


Рис. 15.

второго семейства, проходя через каустику, превращаются в лучи первого семейства.

Таким образом, в нашем случае накрывающее пространство состоит из двух экземпляров кругового кольца, склеенных между собой по окружностям радиусов a и a_0 , т. е. является тором.

Но, как хорошо известно, на торе имеются два независимых контура, которые не стягиваются в точку. Соответственно мы имеем два условия квантования.

*) Очевидно, что траектория, описываемая таким лучом, совпадает с траекторией идеального бильярдного шара, движущегося внутри кругового бильярда. В данном случае движение шара внутри кругового кольца будет эргодическим. Заметим, что вопрос об эргодичности в квантовом случае является значительно более простым, чем в классической механике. Доказательство эргодической теоремы в квантовом случае было дано И. фон Нейманом (1929). Заметим здесь же, что если ввести комплексные траектории, касающиеся каустики, то с их помощью можно найти волновые функции и вне кругового кольца. Они оказываются экспоненциально малыми по величине. Сравните с рассмотрением задачи о прохождении частицы через потенциальный барьер, разобранный в следующем параграфе, с использованием мнимого времени.

В качестве первого контура мы выберем окружность радиуса a_0 (рис. 16). Этот контур не пересекает каустик, что становится очевидным при небольшом увеличении радиуса. Первое условие квантования, таким образом, имеет вид

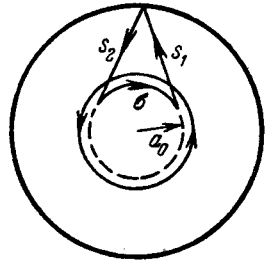


Рис. 16.

$$k \cdot 2\pi a_0 = 2\pi m. \quad (3.18)$$

Это условие квантования имеет простой физический смысл: момент количества движения L квантуется и равен $m\hbar$.

Второй контур, где $d = 1$, $b = 1$, удобно деформировать (что не изменяет значения интеграла) в контур, показанный на рис. 16. После вычисления интеграла $\oint p dq$ получаем

$$2k \left[\sqrt{a^2 - a_0^2} - a_0 \arccos \frac{a_0}{a} \right] = 2\pi \left(n + \frac{3}{4} \right). \quad (3.19)$$

Исключая a_0 , с помощью (3.18) получаем

$$\sqrt{k^2 a^2 - m^2} - m \arccos \frac{m}{ka} = \pi \left(n + \frac{3}{4} \right). \quad (3.20)$$

Это трансцендентное уравнение определяет собственные значения $k = k_{mn}$ и, в соответствии с (3.12), собственные значения энергии.

В двух предельных случаях $m \ll ka$ и $m \approx ka$ из (3.20) находим

$$ka \approx \pi \left(n + \frac{m}{2} + \frac{3}{4} \right), \quad (3.21)$$

$$ka \approx m + \frac{m^{1/3}}{2} \left[3\pi \left(n + \frac{3}{4} \right) \right]^{2/3}. \quad (3.22)$$

В случае $m \approx ka$ решение практически равно нулю, за исключением узкой области вблизи границы. Существование такого рода решений для круговой области было впервые обнаружено Рэлеем (1910) при рассмотрении явления шепчущей галереи в акустике.

В качестве второго примера рассмотрим плоскую область D , ограниченную эллипсом с фокусами на оси x в точках $\pm c/2$. Отрезок, соединяющий фокусы, обозначим через f . Все лучи, проходящие внутри D , можно разделить на два класса; лучи, которые не пересекают f , и лучи, которые пересекают f .

Луч, не пересекающий f , ведет себя подобно лучу, рассмотренному в случае круга (ср. с рассмотрением случая эллиптического бильярда в книге Г. Биркгофа

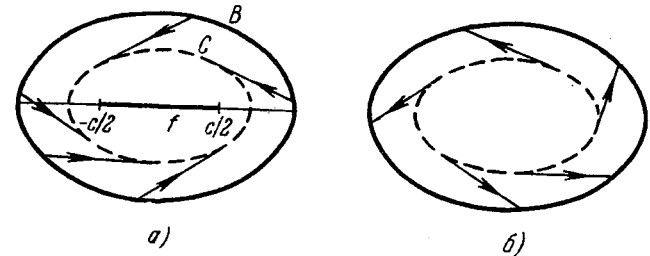


Рис. 17.

(1927)): он всюду касается эллипса C , софокусного эллипсу B^*) (соответствующие конгруэнции лучей изображены на рис. 17, а, б). Эллипс C является каустикой, аналогичной окружности радиуса a_0 в предыдущей задаче, и первое квантовое условие имеет вид $kL = 2\pi m$, где L — длина эллипса C^{**}). Второе квантовое условие также аналогично соответствующему условию для круга.

Иная картина возникает для луча, пересекающего отрезок f . В этом случае он уже не будет касаться никакого конфокального эллипса, однако он, так же

*) Утверждение, по существу эквивалентное этому, было известно еще Г. Лейбницу (1704).

***) Соответствующую волновую функцию обозначим через $\psi_m(r)$. Эта функция является естественным обобщением волновой функции с определенным значением момента количества движения в случае круга на случай эллипса, а также произвольной области. Естественно назвать ее волновой функцией с определенным квазимоментом m . Заметим, что если радиус-вектор r обходит один раз начало координат, то комплексная величина $\psi_m(r)$ на соответствующей плоскости обходит начало координат ровно m раз. Это свойство функции $\psi_m(r)$ является точным и не зависит от возможности описания ее с помощью квазиклассического приближения.

как и все последующие отраженные лучи, будет касаться конфокальной гиперболы (рис. 18). Нетрудно видеть, что через каждую точку внутри такого криволинейного четырехугольника $ABCD$ можно провести четыре луча, касательных к данной гиперболе. Поэтому накрывающее пространство в этом случае состоит из четырех

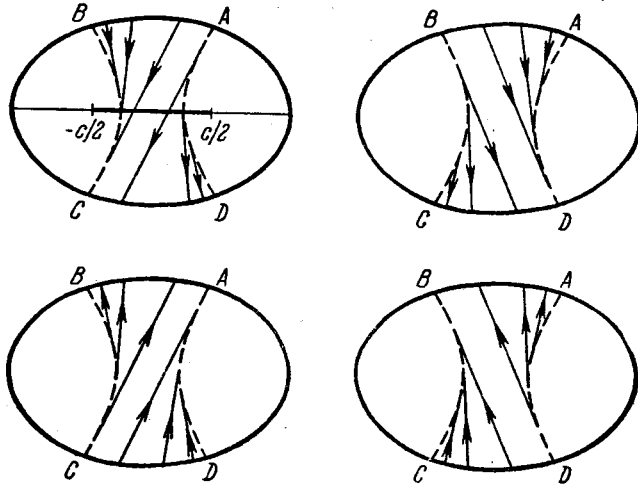


Рис. 18.

криволинейных четырехугольников, соответствующим образом склеенных по границе. Более подробное рассмотрение показывает, что при этом получается тор.

Перейдем к эллиптическим координатам:

$$x = \frac{c}{2} \operatorname{ch} \mu \cos \theta, \quad y = \frac{c}{2} \operatorname{sh} \mu \sin \theta, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi, \quad 0 < \mu < \mu_0.$$

Первое квантовое условие ($d = 2, b = 0$) при этом имеет вид

$$2k \int_A^B \nabla S ds = 2kc \int_0^{\pi/2} (\cos^2 \theta_0 - \cos^2 \theta)^{1/2} d\theta = 2\pi \left(m + \frac{1}{2} \right) \quad m = 0, 1, \dots \quad (3.23)$$

Для второго квантового условия ($d = 0, b = 2$) мы получаем

$$2k \int_B^C \nabla S ds = 2kc \int_0^{\mu_0} (\operatorname{ch}^2 \mu - \cos^2 \theta_0)^{1/2} d\mu = 2\pi(n + 1) \quad (3.24)$$

$$n = 0, 1, \dots$$

Таким образом, развитый метод позволяет сравнительно просто написать условия квантования (3.23) и (3.24). Детальный анализ этих условий квантования и приближенного описания волновой функции в разных областях дан в работе Дж. Келлера и С. Рубинова (1960).

Несколько по-другому эти вопросы рассмотрены в работе В. П. Быкова и Л. А. Вайнштейна (1964).

Интересный предельный случай получается, когда $A \rightarrow B$. При этом разрешенная область превращается в отрезок малой полуоси эллипса; вне этого отрезка волновая функция стремится к нулю. Из уравнений (3.23) и (3.24) в этом случае следует:

$$2kb = \pi n + 4 \left(m + \frac{1}{2} \right) \left(\operatorname{arctg} e^{\mu_0} - \frac{\pi}{4} \right), \quad (3.25)$$

где b — длина малой полуоси эллипса.

Соответствующие волновые функции получили название волновых функций типа «прыгающего мячика». Они играют важную роль при рассмотрении лазеров и открытых резонаторов (В. П. Быков, Л. А. Вайнштейн, 1964; В. П. Быков, 1965; Л. А. Вайнштейн, 1965). Так, например, при вырезании участка эллипса вне нашего четырехугольника поле существенно не меняется, поскольку вне четырехугольника оно экспоненциально падает. Однако закрытый резонатор при этом превращается в открытый и поле, находящееся первоначально внутри эллипса, будет медленно излучаться в пространство.

Тем же способом были рассмотрены (Дж. Келлер, С. Рубинов, 1960) случаи, когда область D имеет вид равностороннего треугольника или прямоугольника.

Интересно, что при этом получается полное совпадение с точными результатами. Заметим, что во всех этих

случаях те же результаты могли быть получены путем разделения переменных. Однако из способа рассмотрения ясно, что и в общем случае могут существовать волновые функции типа шепчущей галереи и типа прыгающего мячика.

В общем случае мы имеем плоскую выпуклую область D , ограниченную гладкой замкнутой кривой B . Предположим, что можно найти однопараметрическое семейство гладких замкнутых кривых $C(\alpha)$, зависящих от параметра α и обладающих тем свойством, что луч, касательный к $C(\alpha)$, после отражения остается касательным к $C(\alpha)$, причем при изменении параметра α кривая $C(\alpha)$ может как угодно близко приближаться к границе B . Тогда, повторяя все предыдущие рассуждения, мы получаем волновую функцию, сосредоточенную вблизи границы, т. е. волновую функцию типа шепчущей галереи. Заметим, что эта же конструкция используется при рассмотрении «проблемы бильярдного шара» в классической механике (см. книгу Г. Биркгофа, 1927).

Обозначим через s длину дуги вдоль B , через $a(s)$ — радиус кривизны на B , через $\rho(s)$ — расстояние от B до C вдоль нормали к B . Если C близко к B , то радиус кривизны в любой точке C приблизительно равен радиусу кривизны в соответствующей точке на границе B . Постоянство величины $s_1 + s_2 - \sigma$ (в случае круга соответствующие величины изображены на рис. 16) приводит к равенству

$$2(a\rho)^{1/2} - 2a \operatorname{arctg} \left(\frac{2\rho}{a} \right)^{1/2} = 4a. \quad (3.26)$$

Решая это уравнение, получаем

$$\rho(s) = a^{2/3} a^{1/3}(s). \quad (3.27)$$

Условия квантования принимают теперь вид

$$kL = 2\pi m \quad \text{и} \quad k\alpha = \pi \left(n + \frac{3}{4} \right), \quad (3.28)$$

где L — длина контура $C(\alpha)$. С другой стороны,

$$L = \int_0^{L_0} \frac{a-\rho}{a} ds = L_0 - \alpha^{2/3} \int_0^{L_0} a^{-2/3}(s) ds, \quad (3.29)$$

где L_0 — длина границы области B , откуда находим выражение для k :

$$k = \frac{2\pi m}{L_0} + \left(\frac{2\pi m}{L_0} \right)^{1/3} \left[\pi \left(n + \frac{3}{4} \right) \right]^{2/3} L_0^{-1} \int_0^{L_0} a^{-2/3}(s) ds. \quad (3.30)$$

Для круга это выражение переходит в (3.22).

Помимо рассмотренного семейства волновых функций, может существовать другое семейство, аналогичное решениям для эллипса с гиперболическими каустиками. Это волновые функции, сосредоточенные вблизи диаметра области, перпендикулярного к границе в обоих концах. В классической механике они соответствуют частице, движущейся по диаметру туда и обратно. В квантовом случае необходимо потребовать еще, чтобы это движение было устойчиво, т. е. чтобы частица при небольших отклонениях не выходила из окрестности этого диаметра. Известно, что в случае выпуклой области движение по максимальному диаметру всегда неустойчиво, движение же по минимальному диаметру может быть как устойчивым, так и неустойчивым (Г. Биркгоф, 1927). Условие устойчивости имеет вид (Г. Бойд, Х. Когелник, 1962)

$$0 < \left(1 - \frac{D}{R_1} \right) \left(1 - \frac{D}{R_2} \right) < 1, \quad (3.31)$$

где D — диаметр области, R_1 и R_2 — радиусы кривизны границы на концах диаметра. Величины k_{mn} определяются уравнением

$$k_{mn} = \frac{1}{D} \left[\pi n + \left(m + \frac{1}{2} \right) \operatorname{arccos} \sqrt{\left(1 - \frac{D}{R_1} \right) \left(1 - \frac{D}{R_2} \right)} \right]. \quad (3.32)$$

Еще один тип квазиклассических волновых функций — это волновые функции, сосредоточенные вблизи устойчивых замкнутых геодезических на границе. Простейшим примером таких функций являются сферические функции Y_{il} при $l \rightarrow \infty$, сосредоточенные вблизи экватора сферы. Эти сферические функции уже были получены с помощью аналогичных построений в § 2 гл. II.

Рассмотренные выше конструкции дают возможность построить волновые функции в классически разрешенной области. Для нахождения волновых функций в области, запрещенной классически (например, в области $r < a_0$ для круга), необходимо рассмотреть комплексные траектории, касающиеся каустики (окружности радиуса a_0 в случае круга и двух малых кругов, параллельных экватору в случае сферы).

Эта же конструкция очевидным образом обобщается и на случай движения в потенциальном поле. Именно, каждой устойчивой замкнутой классической траектории соответствует своя серия волновых функций, сосредоточенных вблизи этой траектории.

В заключение отметим, что основным ограничением применимости этого метода является трудность нахождения устойчивых замкнутых классических траекторий.

§ 4. Нестационарные задачи

В стационарном случае решение задачи о прохождении частицы через одномерный потенциальный барьер в квазиклассическом приближении хорошо известно. Коэффициент прохождения D в этом приближении дается формулой (см. книгу Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963))

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right), \quad (4.1)$$

где $|p| = \sqrt{2m(U - E)}$, a и b — классические точки поворота. В нестационарном случае формулой (4.1), однако, пользоваться нельзя. Это видно хотя бы из того, что она зависит от энергии E , которая в нестационарной задаче не сохраняется.

В то же время имеется необходимость в решении задач с переменным во времени барьером. В качестве примера можно привести задачу об ионизации связанного состояния (отрицательного иона, атома) полем сильной световой волны (световой импульс лазера, сконцентрированный в фокусе с помощью линзы).

Теория этого эффекта впервые рассматривалась Л. В. Келдышем (1964). Полученные им результаты уточнялись в работах А. И. Никишова, В. И. Ритуса, (1966); А. М. Переломова и др. (1966А). В этих работах используются различные вычислительные методы, являющиеся, однако, достаточно громоздкими. Между тем «просачивание» электрона через широкий и плавный барьер носит квазиклассический характер как в постоянном, так и в переменном поле и для проницаемости такого барьера может быть получена формула, обобщающая (4.1) (А. М. Переломов и др. 1966Б).

Перейдем к выводу этой формулы*). Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = [H_0 + V(r, t)] \psi(r, t) \quad (4.2)$$

с начальным условием

$$\psi(r, t) = \varphi_0(r) e^{-iE_0 t}, \quad E_0 = -\frac{\kappa^2}{2}. \quad (4.3)$$

Здесь начальная волновая функция $\varphi_0(r)$ удовлетворяет уравнению

$$H_0 \varphi_0 = E_0 \varphi_0, \quad H_0 = -\frac{1}{2} \Delta + V_0(r)$$

— невозмущенный атомный гамильтониан (потенциал $V_0(r)$ в простейшем случае можно считать короткодействующим), $V(r, t)$ — колеблющийся потенциал, вызывающий туннельный переход из связанного состояния $\varphi_0(r)$ в состояния непрерывного спектра. Относительно $V(r, t)$ будем предполагать следующее:

1) $V(r, t)$ меняется периодически:

$$V(r, t + T) = V(r, t), \quad \text{где } T = \frac{2\pi}{\omega};$$

*) В этом параграфе изложение следует работе В. С. Попова и др. (1967). Здесь используется так называемая атомная система единиц; $e = m = \hbar = 1$. Если κ^{-1} — характерный размер системы, то в этих единицах κ — характерный импульс, $E_0 \sim \kappa^2$ — энергия, κ^{-2} — время, $F_0 = \kappa^3$ — напряженность электрического поля в атоме; для атома водорода $F_0 = m^2 e^5 \hbar^{-4} = 5,14 \cdot 10^9$ в/см.

2) в области $\kappa r \leq 1$, где в основном сосредоточена волновая функция $\varphi_0(\mathbf{r})$, потенциал $V(\mathbf{r}, t)$ является слабым возмущением: $V(\mathbf{r}, t) \ll \kappa^2$ при $\kappa r \leq 1$;

3) точки поворота в потенциале $V_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t)$ лежат в области $\kappa r \gg 1$ при всех значениях t .

В этих условиях вероятность туннелирования определяется далеким «хвостом» волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ и имеется широкая область, в которой движение квазиклассично. Под действием возмущения $V(\mathbf{r}, t)$ связанный уровень превращается в квазистационарное состояние, среднее время жизни которого много больше атомных времен κ^{-2} . Вводя функцию Грина $G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$, описывающую движение электрона на больших расстояниях (при $\kappa r > 1$) и удовлетворяющую уравнению

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{1}{2\mathfrak{E}} \Delta_2 - V(\mathbf{r}_2, t_2) \right] G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = i\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \delta(t_2 - t_1), \quad (4.4)$$

перепишем уравнение (4.2) с начальным условием (4.3) в виде интегрального уравнения

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = -i \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \int d\mathbf{r}_1 G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) V_0(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_1, t_1) + \int d\mathbf{r}_1 G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_0) \psi(\mathbf{r}_1, t_0). \quad (4.5)$$

Последний член в (4.5) описывает расплывание начального состояния и затухает $\sim [\kappa^2(t - t_0)]^{-3/2}$. Устремляя t_0 к $-\infty$, приходим к уравнению для квазистационарного состояния

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = -i \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 \int d\mathbf{r}_1 G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) V_0(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_1, t_1). \quad (4.6)$$

Поскольку потенциал $V_0(\mathbf{r})$ короткодействующий, $\psi(\mathbf{r}, t)$ можно заменить на волновую функцию невозмущенного атома

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = -i \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 \int d\mathbf{r}_1 e^{-iE_0 t_1} G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) V_0(\mathbf{r}_1) \varphi_0(\mathbf{r}_1). \quad (4.7)$$

Вычисляя с помощью этой волновой функции поток частиц, уходящих на бесконечность, получаем вероятность туннелирования W в виде суммы вероятностей «многофотонных» процессов:

$$W = \sum_{n \geq \nu} W_n, \quad W_n = 2\pi \int d\mathbf{p} \delta\left(\frac{p^2}{2} - \frac{p_n^2}{2}\right) |F(\mathbf{p})|^2, \quad (4.8)$$

где

$$F(\mathbf{p}) = i \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\psi(\mathbf{p}, t)}{t - t_0}, \quad p_n = \sqrt{2(n - \nu)\omega}. \quad (4.9)$$

Величина ν в (4.9) дает порог туннелирования (минимальное число квантов, поглощение которых необходимо для отрыва электрона от атома). Для определения ν учтем, что после выхода из-под барьера электрон находится в поле

$$V(\mathbf{r}, t) = \sum V_n(\mathbf{r}) \cos(n\omega t + \alpha_n).$$

Рассматривая влияние $V(\mathbf{r}, t)$ по методу П. Л. Капицы (1951)*, заменим быстро осциллирующее поле $V(\mathbf{r}, t)$ эффективным потенциалом

$$V_{\text{эфф}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\omega^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f_n^2(\mathbf{r})}{n^2}, \quad f_n(\mathbf{r}) = -\frac{\partial V_n}{\partial \mathbf{r}}. \quad (4.10)$$

Поскольку $V_{\text{эфф}} > 0$, то уход электрона на бесконечность возможен лишь при условии ограниченности $V_{\text{эфф}}(\mathbf{r})$ при $r \rightarrow \infty$. В этом случае

$$\nu = \frac{\omega_0}{\omega} \left[1 + \frac{1}{2(\omega\kappa)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f_n^2}{n^2} \right], \quad \text{где } f_n = \lim_{r \rightarrow \infty} f_n(\mathbf{r}). \quad (4.11)$$

Добавка к единице в выражении для ν пропорциональна средней по периоду кинетической энергии электрона, уходящего на бесконечность в периодически колеблющемся потенциале $V(\mathbf{r}, t)$.

Для нахождения вероятности туннелирования W_n с поглощением n квантов с энергией $\hbar\omega$ каждый нам

*) Метод П. Л. Капицы изложен в «Механике» Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1958).

нужно знать волновую функцию $\psi(\mathbf{p}, t)$ с определенным средним импульсом p_n на бесконечности. Как нетрудно видеть, эта функция удовлетворяет уравнению типа (4.7), в котором надо заменить $G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ на функцию Грина в смешанном \mathbf{p}, \mathbf{r} представлении:

$$\psi(\mathbf{p}_2, t_2) = -i \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 e^{-iE_0 t_1} \int d\mathbf{r}_1 G(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) V_0(\mathbf{r}_1) \Phi_0(\mathbf{r}_1), \quad (4.7a)$$

$$G(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2} G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) d\mathbf{r}_2. \quad (4.12)$$

Используя для $G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ квазиклассическое приближение (Р. Фейнман, А. Хибс, 1965)

$$G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) \approx \frac{\theta(t_2 - t_1)}{[2\pi i (t_2 - t_1)]^{3/2}} e^{iS(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)}, \quad (4.13)$$

$$S(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}, t) \right) dt \quad (4.14)$$

и вычисляя интеграл в (4.12) методом перевала, находим (с точностью до предэкспоненциального множителя) квазиклассическую асимптотику для $G(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$

$$G(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) \sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{iW(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)}, \quad W = S - \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2. \quad (4.15)$$

Действие S в (4.15) вычисляется вдоль классической траектории, определяемой условиями: $\mathbf{r}(t_1) = \mathbf{r}_1$, $\mathbf{p}(t_2) = \mathbf{p}_2$. Варьируя W при фиксированных t_1 и t_2 с учетом известной формулы $\delta S = \mathbf{p}_2 \delta \mathbf{r}_2 - \mathbf{p}_1 \delta \mathbf{r}_1$, получаем $\delta W = -\mathbf{r}_2 \delta \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1 \delta \mathbf{r}_1$, откуда следуют выражения для \mathbf{r}_2 и \mathbf{p}_1

$$\mathbf{r}_2 = -\frac{\partial W}{\partial \mathbf{p}_2}, \quad \mathbf{p}_1 = -\frac{\partial W}{\partial \mathbf{r}_1}. \quad (4.16)$$

Для полной производной $\frac{dW}{dt_1}$, взятой вдоль траектории, имеем из (4.15)

$$\frac{dW}{dt_1} = \frac{dS}{dt_1} = -L(t_1);$$

с другой стороны,

$$\frac{dW}{dt_1} = \frac{\partial W}{\partial t_1} + \frac{\partial W}{\partial \mathbf{r}_1} \dot{\mathbf{r}}_1 = \frac{\partial W}{\partial t_1} - \mathbf{p}_1 \dot{\mathbf{r}}_1.$$

Сравнивая эти выражения, находим

$$\frac{\partial W}{\partial t_1} = \mathbf{p}_1 \dot{\mathbf{r}}_1 - L(t_1) = H(t_1). \quad (4.17)$$

Подставляя формулу (4.15) для G в (4.7a), приходим к интегралу, содержащему быстро осциллирующую экспоненту:

$$\psi(\mathbf{p}_2, t_2) = \frac{e^{-iE_0 t_2}}{(2\pi i)^{3/2}} \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 \int d\mathbf{r}_1 e^{i\tilde{W}(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)} V_0(\mathbf{r}_1) \Phi_0(\mathbf{r}_1), \quad (4.18)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{W}(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) &= \tilde{S}(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) - \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2 = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} (L(t) + E_0) dt - \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2 \end{aligned} \quad (4.18a)$$

(\tilde{S} — так называемое укороченное действие, см. § 1).

Основной вклад в интеграл (4.18) при этом вносит точка перевала. Условия перевала по переменным t_1 и \mathbf{r}_1 в случае плавного потенциала $V_0(\mathbf{r})$ имеют вид

$$H(t_1^{(0)}) = E_0 = -\frac{\kappa^2}{2}, \quad \mathbf{p}(t_1^{(0)}) = 0. \quad (4.19)$$

Согласно Р. Фейнману (1948), среди всех путей, вносящих вклад в $\psi(\mathbf{p}_2, t_2)$, в квазиклассическом случае «выживают» лишь пути, лежащие в окрестности классической траектории. Специфика данной задачи состоит в том, что не существует такой вещественной траектории, которая удовлетворяла бы уравнениям Ньютона, начальным условиям (4.19) и условию $\mathbf{p}(t_2) = \mathbf{p}_2$, поскольку прохождение частицы через потенциальный барьер в классической механике невозможно. Это приводит к тому, что «начальный момент» $t_1^{(0)}$ уходит в комплексную плоскость. Тем не менее формальный аппарат классической механики продолжает работать. Вычисляя интеграл (4.18) методом перевала, получаем

с точностью до предэкспоненциального множителя:

$$\psi(\mathbf{p}_2, t_2) \sim (t_2 - t_0) \exp \{i [\tilde{W}(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1^0, t_1^{(0)}) - E_0 t_2]\} + \\ + \text{члены конечные при } t_2 \rightarrow +\infty. \quad (4.186)$$

Окончательное выражение для $|F(\mathbf{p})|^2$ принимает вид

$$|F(\mathbf{p})|^2 \sim \exp \{-2 \operatorname{Im} \tilde{W}(\mathbf{p}_2, t_2; \mathbf{r}_1^0, t_1^{(0)})\}. \quad (4.20)$$

Формулы (4.8) и (4.20) определяют вероятность туннелирования W_n . Для нахождения предэкспоненциального множителя, а также импульсного спектра вылетающих частиц необходимо учесть вклад траекторий, близких к экстремальной. Детальный расчет этих величин можно найти в работе В. С. Попова и др. (1967). Подчеркнем, что в (4.20) входят лишь величины, относящиеся к классической траектории частицы, причем значение $|F(\mathbf{p})|^2$ зависит только от подбарьерного участка траектории.

Для подбарьерного движения в постоянном поле $\mathbf{p}_2 = 0$ и $\tilde{W} = \tilde{S}$, кроме того, в силу закона сохранения энергии $\tilde{S} = \int \dot{\mathbf{r}}^2 dt$. Заменяя в (4.8) суммирование по n интегрированием (что законно ввиду $\omega \rightarrow 0$), приходим к формуле для проницаемости статического барьера

$$D \sim \exp \left\{ -2 \left| \int_{r_1}^{r_2} \mathbf{p} dr \right| \right\}; \quad \mathbf{p}^2 = 2(E - U(\mathbf{r})) < 0. \quad (4.21)$$

Здесь r_1 и r_2 — классические точки поворота, а интеграл берется по экстремальной траектории, минимизирующей $\operatorname{Im} \tilde{S}(r_2, r_1)$. В одномерном случае вопрос о нахождении экстремальной траектории отпадает и (4.21) переходит в известную формулу (4.1).

Покажем теперь, что последовательный переход к мнимому «времени» $\tau = it$ в уравнениях подбарьерного движения приводит к наглядной картине просачивания частицы через барьер. Мы ограничимся ниже случаем однородного поля: $V(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{F}(t)\mathbf{r}$, однако результаты имеют более общее значение.

Пусть частица связана короткодействующими силами. Рассмотрим сначала ионизацию такой системы постоянным электрическим полем. В одномерном случае классическая «траектория» определяется уравнением Ньютона $\ddot{x} = F$ и начальными условиями $x(t_0) = 0$, $\dot{x}(t_0) = ix$. Выбирая начало отсчета времени в тот момент, когда $\dot{x} = 0$ (момент выхода частицы из-под барьера), имеем

$$\dot{x} = Ft, \quad x = \frac{F}{2}(t^2 - t_0^2), \quad t_0 = \frac{ix}{F}. \quad (4.22)$$

В процессе движения частицы «время» t изменяется от t_0 до 0. В момент $t = 0$ ($\dot{x} = 0$, $x = x_0 = \frac{x^2}{2F}$) частица выходит из-под барьера, и дальнейшая часть траектории имеет смысл и в классической механике.

Найденная «траектория» является аналитическим решением уравнений классической механики (в частности, точка $t = 0$ не является точкой разрыва). При переходе в квантовую область она приобретает физический смысл: действие \tilde{S} , вычисленное вдоль такой траектории, определяет волновую функцию $\psi(x, t)$ (в квазиклассическом приближении). Из (4.22) находим

$$\tilde{W}(t, t_0) = \tilde{S}(t, t_0) = \int_{t_0}^t \dot{x}^2 dt' = \frac{F^2}{3}(t^3 - t_0^3). \quad (4.22a)$$

Заметим, что, как следует из (4.22a), $\operatorname{Im} S(t, t_0)$ после выхода из-под барьера остается постоянной величиной. Для коэффициента прохождения через барьер получаем

$$D_{\text{ст}}(F) \sim \exp \{-2 \operatorname{Im} \tilde{S}(0, t_0)\} = \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{F_0}{F} \right\}, \quad F_0 = x^3. \quad (4.23)$$

Таким образом, (4.22a) с точностью до константы дает правильное выражение для $W_{\text{ст}}$ в одномерном случае.

Переходя к трехмерному случаю, заметим, что поле не меняет поперечного импульса частицы \mathbf{p}_\perp , который остается при этом классическим ($\mathbf{p}_\perp^2 > 0$). Подбарьерное движение имеется лишь в направлении поля. Таким

образом, задача сводится к одномерной: меняется лишь начальное условие, теперь $\dot{x}(t_0) = i \sqrt{x^2 + p_{\perp}^2}$, что эквивалентно замене

$$x \rightarrow x' = \sqrt{x^2 + p_{\perp}^2} \approx x \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p_{\perp}^2}{x^2} + \dots \right). \quad (4.24)$$

Выполняя эту замену в (4.23), получаем

$$D_{\text{ст}}(F, p_{\perp}) \sim \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{x^3}{F} - \frac{x^3}{F} \frac{p_{\perp}^2}{x^2} \right\}, \quad (4.25)$$

откуда

$$W_{\text{ст}}(F) = \int dp_{\perp}^2 D_{\text{ст}}(F, p_{\perp}) \sim \frac{F}{x} \exp \left(-\frac{2}{3} \frac{x^3}{F} \right). \quad (4.26)$$

Точная формула для вероятности ионизации s -уровня в короткодействующем потенциале имеет следующий вид (Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев, 1964):

$$W_{\text{ст}}(F) = \frac{x^2}{2} |C_{\infty}|^2 \left(\frac{F}{x^3} \right) \exp \left(-\frac{2}{3} \frac{x^3}{F} \right), \quad (4.27)$$

где C_{∞} — коэффициент, определяющий асимптотику нормированной волновой функции ($\psi \approx C_{\infty} \sqrt{x} r^{-1} e^{-x}$ при $r \rightarrow \infty$).

Сравнение формул показывает, что с точностью до численного коэффициента порядка единицы значение $W_{\text{ст}}(F)$ в постоянном поле также может быть получено с помощью (4.23).

Перейдем теперь к рассмотрению ионизации системы, связанной с короткодействующими силами, в поле световой волны с линейной поляризацией. Нахождение квазиклассического решения этой задачи возможно благодаря следующим упрощающим обстоятельствам:

1. Мы ограничимся случаем не слишком высоких частот $\omega \ll \omega_0 = \frac{\hbar x^2}{2m}$ ($\hbar \omega_0 = I$ — потенциал ионизации атома, ω — частота света), т. е. рассматриваем случай многофотонной ионизации. Поле при этом может рассматриваться классически. Кроме того, будем считать, что напряженность поля F в световой волне много меньше атомной напряженности $F_0 = x^3$: $F \ll F_0$. При этом ионизация происходит медленно по сравнению с атом-

ными временами, а потенциальный барьер является широким, благодаря чему оказывается возможным применить квазиклассическое приближение.

2. Длина световой волны много больше радиуса атома, в силу чего электрическое поле можно считать однородным.

3. Поскольку электрон в атоме — частица нерелятивистская, действием магнитного поля можно пренебречь.

Прежде чем приступить к решению задачи, заметим, что, помимо величины $\omega_0 = I/\hbar$, здесь имеется другая важная частота — частота туннелирования ω_t (здесь $1/\omega_t$ — время свободного пролета электрона с импульсом x через потенциальный барьер, ширина которого, как нетрудно видеть, равна $\frac{F_0}{x} = \frac{x^2}{F}$). При этом из неравенства $F/F_0 \ll 1$ следует $\hbar \omega_t \ll I$. Введем параметр $\gamma = \frac{\omega}{\omega_t} = \frac{\omega x}{F}$, характеризующий «степень адиабатичности».

В адиабатическом случае $\gamma \ll 1$, $\omega \ll \omega_t \ll I$, и формула для вероятности ионизации может быть получена путем усреднения соответствующей статической формулы (см. раздел 2 в работе А. М. Переломова и др. (1966А)). Наиболее интересен, однако, как с точки зрения теории, так и с точки зрения эксперимента антиадиабатический случай $\gamma \gg 1$. Так, например, при ионизации нейтральных атомов светом рубинового лазера (Г. А. Делоне, Н. Б. Делоне, 1968) $n_{\text{min}} \sim 10$, $F \sim \sim 10^7$ в/см, $\gamma \sim 30-40$.

Итак, пусть световая волна имеет линейную поляризацию, направленную, например, по оси x , и напряженность поля $F(t) = F \cos \omega t$. Для системы, связанной короткодействующими силами (например, для отрицательного иона), при $r > 0$ действием этих сил можно пренебречь и классическую траекторию $x(t)$ найти из уравнения *)

$$\ddot{x} = F \cos \omega t, \quad x(t_0) = 0, \quad \dot{x}(t_0) = ix. \quad (4.28)$$

*) Мы рассматриваем здесь лишь экстремальную классическую траекторию, для которой $\text{Im } \tilde{W}$ в формуле (4.20) принимает минимальное значение. Такая траектория дает главный вклад в вероятность ионизации W . Нетрудно показать, что в рассматриваемом

Отсюда имеем

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}(t) &= p_x + \frac{F}{\omega} \sin \omega t, \\ x(t) &= p_x (t - t_0) - \frac{F}{\omega^2} (\cos \omega t - \cos \omega t_0), \end{aligned} \right\} \quad (4.29)$$

где $p_x = i\kappa - \frac{F}{\omega} \sin \omega t_0$; p_x является средним импульсом частицы (по направлению поля) при ее движении на бесконечность.

Частица выходит из-под барьера в момент времени $t = 0$, когда поле достигает амплитудного значения. Начальный момент t_0 находится из уравнения

$$\sin \omega t_0 = \frac{\omega}{F} (i\kappa - p_x) = \gamma \left(i - \frac{p_x}{\kappa} \right), \quad (4.30)$$

которое можно представить в виде

$$\left(p + \frac{F}{\omega} \sin \omega t_0 \right)^2 = -\kappa^2. \quad (4.31)$$

Экстремальная траектория, соответствующая минимуму $\text{Im } \tilde{W}$, отвечает при этом $p_{\perp} = 0$, $p_x = 0$, $\omega t_0 = i \operatorname{arsh} \gamma$, $\gamma = \frac{\omega}{F} = \frac{\omega \kappa}{F}$; время t_0 при этом оказывается чисто мнимым. Для наглядного описания подбарьерного движения поэтому удобно перейти к вещественному времени $\tau = it$ ($-\tau_0 \leq \tau \leq 0$). Уравнения, описывающие движение, принимают теперь вид

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 x}{d\tau^2} &= -F \operatorname{ch} \omega \tau, & \frac{dx}{d\tau} &= -\frac{F}{\omega} \operatorname{sh} \omega \tau, \\ x &= \frac{F}{\omega^2} (\operatorname{ch} \omega \tau_0 - \operatorname{ch} \omega \tau). \end{aligned} \right\} \quad (4.32)$$

случае она соответствует движению частицы вдоль поля с равным нулю поперечным импульсом $p_{\perp} = 0$. Траектории с $p_{\perp} \neq 0$ определяют импульсный спектр вылетающих при ионизации частиц. Их учет также возможен в рамках квазиклассического метода (В. С. Попов и др., 1967).

Отсюда находим длину барьера

$$x_0 = \frac{F}{\omega^2} (\operatorname{ch} \omega \tau_0 - 1) = \frac{\kappa^2}{F} (1 + \sqrt{1 + \gamma^2})^{-1} = \begin{cases} \frac{\kappa^2}{2F} & (\gamma \ll 1), \\ \frac{\kappa}{\omega} & (\gamma \gg 1). \end{cases} \quad (4.33)$$

При фиксированной напряженности электрического поля F с увеличением частоты длина барьера уменьшается, барьер становится «более коротким», что и объясняет возрастание $W(F, \omega)$ с ростом ω .

Интересно отметить, что подбарьерная траектория $x(t)$ может быть получена с помощью некоторого «эффективного» потенциала, не зависящего от времени. В самом деле, исключая время τ из уравнений (4.32), имеем

$$\ddot{x}(\tau) = -\frac{\partial V_{\text{эфф}}}{\partial x}, \quad \text{где } V_{\text{эфф}}(x) = F \sqrt{1 + \gamma^2} x - \frac{\omega^2 x^2}{2}.$$

Обращает на себя внимание довольно простой вид $V_{\text{эфф}}$. Несомненно, вычисление вероятности туннелирования крайне упростилось бы, если бы имелся метод нахождения $V_{\text{эфф}}$ непосредственно, без предварительного решения уравнений подбарьерного движения. В настоящее время такой метод неизвестен.

Зная закон изменения $x(t)$, нетрудно найти действие

$$\begin{aligned} \tilde{S}(0, t_0) &= \int_{t_0}^0 \left(\frac{\dot{x}^2}{2} + Fx \cos \omega t' - \frac{\kappa^2}{2} \right) dt' = \\ &= i \frac{\omega_0}{\omega} \left[\left(1 + \frac{1}{2\gamma^2} \right) \operatorname{Arsh} \gamma - \frac{\sqrt{1 + \gamma^2}}{2\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Выражение для вероятности ионизации W принимает теперь (с точностью до предэкспоненциального множителя) вид *)

$$W \sim \exp \left\{ -\frac{2\omega_0}{\omega} f(\gamma) \right\}, \quad f(\gamma) = \left(1 + \frac{1}{2\gamma^2} \right) \operatorname{Arsh} \gamma - \frac{\sqrt{1 + \gamma^2}}{2\gamma}. \quad (4.35)$$

*) Эта формула для W была впервые получена иным методом Л. В. Келдышем (1964). Здесь при выводе формулы (4.35) мы использовали метод работы А. М. Переломова и др. (1966Б), который обладает наглядностью рассмотрения и быстрее приводит к цели.

Функция $f(\gamma)$ в (4.35) является монотонно возрастающей, откуда следует, что при фиксированном значении частоты ω вероятность W монотонно возрастает с ростом напряженности поля F . При $\gamma \ll 1$, $f(\gamma) \sim \frac{2}{3} \gamma$ и, как и следовало ожидать, (4.35) переходит в формулу для постоянного поля $W \sim \exp\left(-\frac{2}{3} \frac{\kappa^3}{F}\right)$.

При $\gamma \gg 1$, $f(\gamma) \sim \ln 2\gamma - \frac{1}{2}$ и $W \sim \left(\frac{1}{2\gamma}\right)^{\frac{2k_0}{\omega}} \sim \left(\frac{F}{F_{\text{эфф}}}\right)^{2k_0}$, где k_0 — целая часть величины $\frac{I}{\hbar\omega} + 1$, что качественно согласуется с формулой теории возмущений порядка k_0 .

Следует особо подчеркнуть то обстоятельство, что как многоквантовая ионизация, так и многоквантовый фотоэффект представляют качественно новые явления, которые стало возможно наблюдать лишь в связи с созданием интенсивных лазерных источников света. Старые исследования одноквантового фотоэффекта, например открытие красной границы фотоэффекта и одноквантовой ионизации, как хорошо известно, сыграли фундаментальную роль в экспериментальном обосновании квантовой теории. Исследования многоквантовых эффектов позволяют уточнить границы применимости основных законов фотоэффекта — законов Столетова и Эйнштейна: строго говоря, красная граница фотоэффекта отсутствует, однако в случае обычных источников света вероятность фотоионизации атома при $\hbar\omega < I$ мала. Поэтому законы фотоэффекта в этом практически важном случае остаются справедливыми, а отклонение от них начинается лишь при больших интенсивностях света.

Для простоты изложения мы привели формулу (4.35) для вероятности ионизации с учетом лишь главного (экспоненциального) члена. Более сложной задачей является получение предэкспоненциального множителя, но и это может быть сделано с помощью квазиклассического метода (В. С. Попов и др., 1967). В этой работе также детально разобран случай ионизации уровня с орбитальным моментом l светом, поляризованным эллиптически.

Следует, однако, иметь в виду, что все эти формулы, строго говоря, относятся к ионизации системы, связанной короткодействующими силами, например отрицательного иона. В случае реального атома из-за дальнего действия кулоновских сил движение электрона искажается на расстояниях, больших по сравнению с радиусом атома.

Покажем, что это приводит к сильному увеличению вероятности процесса ионизации (А. М. Переломов, В. С. Попов, 1967). Рассмотрим простейший случай линейной поляризации света. В этом случае частица после прохождения потенциального барьера останавливается, и потому $\dot{W} = \dot{S}$. Учтем кулоновское взаимодействие по теории возмущений (условие применимости теории возмущений будет дано ниже). Пусть потенциал V имеет вид $V_0 + \delta V$, где δV — малая добавка к V_0 . Тогда, используя (4.18а) и граничное условие $H(x, t)|_{t=t_0} = E_0$, можно показать, что

$$\delta \tilde{S} = - \int_{t_0}^0 \delta V(r(t)) dt, \quad (4.36)$$

где интегрирование производится по невозмущенной траектории (без учета δV).

Эту формулу можно применять, если возмущающий потенциал δV мал вдоль всей классической траектории. В нашем случае это не так: при $\kappa r \leq 1$, $\delta V = -\frac{\kappa c}{r}$ уже нельзя считать малой добавкой. Однако здесь можно воспользоваться процедурой сшивания. Введем такое r_1 , что $1 \ll \kappa r_1 \ll \kappa r_0$. Тогда при $\kappa r_1 \ll \kappa r \ll \kappa r_0$ внутриатомный потенциал уже мал, а внешним полем еще можно пренебречь. В этих условиях волновая функция $\chi(r)$ совпадает с асимптотикой волновой функции свободного атома:

$$\chi(r) \sim \exp\{-\text{Im} \tilde{S}(r)\}, \quad \text{Im} \tilde{S}(r) = \kappa r - \frac{\kappa c}{r} \ln \kappa r. \quad (4.37)$$

Поэтому (4.36) можно преобразовать к виду

$$\delta \tilde{S} = -i\lambda \ln \kappa r_1 - \int_{t_1}^0 \delta V(r(t)) dt, \quad (4.38)$$

где $r_1 = r(t_1)$, а $\lambda = \frac{x_c}{x} = \left(\frac{I}{I_0}\right)^{-1/2}$ — величина, обычно близкая к единице (здесь I и I_0 — потенциалы ионизации рассматриваемого атома и атома водорода).

Интеграл в (4.38) в случае кулоновского взаимодействия вычисляется точно, и мы получаем

$$\delta\tilde{S}(t_0, 0) = -i\lambda \ln \left[\kappa r_1 \frac{\text{sh}\left(\frac{\tau_0 + \tau_1}{2}\right)}{\text{sh}\left(\frac{\tau_0 - \tau_1}{2}\right)} \right], \quad \tau = -i\omega t. \quad (4.39)$$

С другой стороны, из (4.32) следует, что при $t \rightarrow t_0$ $\kappa r(t) = \frac{2\omega_0}{\omega}(\tau_0 - \tau)$, а благодаря множителю $\frac{2\omega_0}{\omega} \gg 1$ существует такой момент τ_1 , что $(\tau_0 - \tau_1) \ll 1$, а $\kappa r_1 \gg 1$. Поэтому в (4.39) можно перейти к пределу $\tau_1 \rightarrow \tau_0$, и мы получаем

$$\delta\tilde{S}(t_0, 0) = -i\lambda \ln \frac{2F_0}{F}, \quad \exp\{-2 \text{Im} \delta\tilde{S}\} = \left(\frac{2F_0}{F}\right)^{2\lambda}. \quad (4.40)$$

Таким образом, учет кулоновского взаимодействия приводит к тому, что вероятность ионизации приобретает дополнительный множитель $(2F_0/F)^{2\lambda}$. В реальных экспериментах (Г. А. Делоне, Н. Б. Делоне, 1968) F достигает величины $\sim 10^7$ в/см и этот множитель имеет порядок 10^6 . Заметим, что зависимость $\delta\tilde{S}$ от частоты выпала, т. е. кулоновская поправка к вероятности ионизации $W(F, \omega)$ имеет тот же вид, что и для статического поля.

Для нахождения границы применимости формулы (4.40) вспомним, что мы исходили из предположения, что кулоновская сила мала по сравнению с напряженностью внешнего поля. Можно показать, что при $\gamma \gg 1$ наибольший вклад в действие дает участок подбарьерной траектории вблизи точки выхода из-под барьера.

Отношение F_c к F в этой точке траектории равно

$$\left(\frac{F_c}{F}\right)_{x=x_0} = \frac{\lambda F}{F_0} (1 + \sqrt{1 + \gamma^2})^2. \quad (4.41)$$

Очевидно, что теория возмущений применима, если эта величина много меньше единицы, т. е. при

$$\gamma \ll \gamma_c = \sqrt{\frac{F_0}{\lambda F}} \quad (\gamma_c \gg 1) \quad (4.42)$$

Учитывая, что свет, испускаемый лазером, имеет фиксированную частоту, перепишем условие (4.42) в виде

$$F \gg \lambda \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 F_0 = \lambda \left(\frac{\hbar\omega}{I_0}\right)^2 F_0, \quad (4.43)$$

который показывает, что кулоновская поправка имеет вид (4.40) только для достаточно сильных полей. К сожалению, такие поля еще не достигаются экспериментально, и потому приведенные выше формулы для вероятности ионизации нельзя непосредственно сравнивать с экспериментальными данными.

Попытка учета кулоновского взаимодействия вне рамок теории возмущений была предпринята в работе А. М. Переломова и др. (1968), однако найти кулоновскую поправку во всей области частот света не удалось. Кулоновская поправка вычислялась также с помощью диаграммной техники (А. И. Никишов, В. И. Ритус, 1967). К сожалению, и этот метод сталкивается здесь с большими трудностями и пока что не привел к решению задачи. Вопрос об учете кулоновского взаимодействия в области $\gamma \geq \gamma_c$ является в настоящее время открытым и представляет большой интерес с точки зрения эксперимента.

В заключение заметим, что изложенный выше квазиклассический метод применим к широкому классу задач о туннелировании через барьер, меняющийся во времени. Этим методом были решены задачи (Л. П. Котова и др., 1968):

1) о развале связанного состояния в кулоновском поле ядра (в частном случае дейтона эта задача была решена ранее Е. М. Лифшицем (1939) несколько иным способом) и ионизации отрицательного иона электронным ударом;

2) о влиянии магнитного поля на вероятность ионизации.

Во всех случаях, когда нахождение траектории классической частицы оказывается возможным, этот метод быстро приводит к ответу и, что не менее важно, сохраняет наглядность рассмотрения.

ГЛАВА VI

ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ
ДЛЯ ОСЦИЛЛЯТОРА§ 1. Введение. Волновая функция осциллятора
с переменной частотой под действием внешней силы

Нестационарные задачи квантовой механики, как правило, решаются приближенными методами (нестационарная теория возмущений, адиабатическое приближение, метод внезапных возмущений и т. д.). Лишь в редких случаях удается решить задачу точно. Важный пример такой системы представляет осциллятор с переменной частотой $\omega(t)$, находящийся под действием внешней силы $f(t)$. В этом случае, как показано в данном параграфе, можно получить явное выражение для волновой функции, причем эволюция ее с течением времени определяется величинами, относящимися к классическому осциллятору. Пусть в начальный момент времени осциллятор находится в n -квантовом состоянии. Тогда в любой последующий момент времени волновая функция осциллятора является суперпозицией m -квантовых состояний и возникает задача вычисления вероятностей перехода W_{mn} из состояния $|n\rangle$ в состояние $|m\rangle$. В § 2 получено явное выражение для величин W_{mn} в случае осциллятора с постоянной частотой, находящегося под действием внешней силы, произвольным образом зависящей от времени. Случай осциллятора с переменной частотой при отсутствии внешней силы подробно рассмотрен в § 3. В следующем параграфе получено выражение для вероятностей перехода W_{mn} в общем случае осциллятора с переменной частотой при наличии внешней силы.

В § 5 вводится и обосновывается понятие квазиэнергии системы, подвергающейся периодическому воздействию. Для осциллятора с периодически меняющимися параметрами спектр квазиэнергий выражается через величины, определяемые из решения классической задачи. В следующем параграфе подробно разобран вопрос об изменении адиабатических инвариантов для квантового осциллятора. Наконец, в § 7 рассмотрены гейзенберговское представление и тесно связанный с ним вопрос о канонических преобразованиях. Приведен простой пример унитарно-неэквивалентных представлений канонических перестановочных соотношений в случае бесконечного числа степеней свободы.

В этом параграфе, следуя работе В. С. Попова и А. М. Переломова (1969), мы найдем вид волновой функции квантового осциллятора.

Уравнение Шредингера для осциллятора с переменной частотой $\omega(t)$, на который действует сила $f(t)$, имеет вид *

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left[\frac{1}{2} \omega^2(t) x^2 - f(t) x \right] \psi. \quad (1.1)$$

Зависимость $\omega(t)$ и $f(t)$ от времени считаем произвольной, предполагая лишь выполнение естественных граничных условий

$$f(t) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad t \rightarrow \pm \infty, \quad (1.2)$$

$$\omega(t) \rightarrow \begin{cases} \omega_- & \text{при} \quad t \rightarrow -\infty, \\ \omega_+ & \text{при} \quad t \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.2')$$

(пределы ω_{\pm} могут быть различными).

Пусть сначала $f(t) \equiv 0$. Обозначая через $\xi(t)$ решение классического уравнения движения для осциллятора

$$\ddot{\xi} + \omega^2(t) \xi = 0 \quad (1.3)$$

с начальным условием

$$\xi(t) \sim e^{i\omega_- t} \quad \text{при} \quad t \rightarrow -\infty, \quad (1.3')$$

*) В этой главе мы всюду используем систему единиц, в которой $m = \hbar = 1$.

положим

$$\xi(t) = r(t) e^{i\gamma(t)}, \quad r(t) = |\xi(t)|. \quad (1.4)$$

Тогда $r(t)$ задает масштаб длины в момент времени t , а величина $\tau = \gamma(t)/\omega_-$ — соответствующий масштаб времени. Естественно искать $\psi(x, t)$ в виде

$$\psi(x, t) = [r(t)]^{-1/2} e^{-i\phi(x, t)} \chi_-(y, \tau), \quad y = \frac{x}{r} \quad (1.5)$$

(множитель $r^{-1/2}$ обеспечивает сохранение нормировки; $\phi(x, t)$ — вещественная фаза). Через χ_- обозначено произвольное решение уравнения Шредингера для осциллятора с частотой ω_- . Подставляем (1.5) в (1.1) и требуем, чтобы полученное уравнение не содержало членов $\sim \frac{\partial \chi_-}{\partial y}$. Этим определяется вид функции $\phi(x, t)$

$$\phi(x, t) = -\frac{\dot{r}x^2}{2r}. \quad (1.6)$$

Уравнение для χ_- принимает форму

$$i \frac{\dot{y}}{\omega_-} \frac{\partial \chi_-}{\partial \tau} = -\frac{1}{2r^2} \frac{\partial^2 \chi_-}{\partial y^2} + \frac{1}{2} \left[\omega^2 + \left(\frac{\dot{r}}{r}\right)^2 + \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{r}}{r}\right) \right] x^2 \chi_-. \quad (1.7)$$

Подставляя (1.4) в (1.3) и учитывая (1.3'), находим

$$\dot{y} = \frac{\omega_-}{r^2}, \quad \frac{\dot{r}}{r} + \omega^2(t) = \dot{y}^2, \quad (1.8)$$

откуда видно, что уравнение (1.7) приводится к виду

$$i \frac{\partial \chi_-}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi_-}{\partial y^2} + \frac{\omega_-^2 y^2}{2} \chi_-, \quad \text{где } y = \frac{x}{r(t)}. \quad (1.7')$$

Таким образом, наложенные выше условия (1.8) не противоречат уравнениям (1.3), (1.4). В дальнейшем нам понадобится величина

$$a = a_1 + ia_2 = -i \frac{\dot{\xi}(t)}{\xi(t)}, \quad a(t) \rightarrow \omega_- \quad \text{при } t \rightarrow -\infty. \quad (1.9)$$

Из (1.4) и (1.9) следует, что

$$a_1 = \dot{y} = \frac{\omega_-}{r^2}, \quad a_2 = -\frac{\dot{\xi}\xi^* + \xi\dot{\xi}^*}{2|\xi|^2} = -\frac{\dot{r}}{r}. \quad (1.10)$$

Тем самым показано, что общее решение уравнения Шредингера для осциллятора с переменной частотой $\omega(t)$ имеет вид (1.5), причем фаза $\phi(x, t) = \frac{1}{2} a_2(t) x^2$. Поскольку при $t \rightarrow -\infty$ $r \rightarrow 1$, $a_2 \rightarrow 0$, $\gamma(t) \sim \omega_- t$, то χ_- в (1.5) есть просто начальная волновая функция осциллятора. Этим решается задача об эволюции произвольного начального состояния осциллятора с переменной частотой $\omega(t)$.

Пусть теперь на осциллятор дополнительно действует внешняя сила $f(t)$. Для того чтобы свести задачу к случаю $f=0$, сделаем в (1.1) подстановку (К. Хусими, 1953)

$$\psi(x, t) = e^{i(\eta x_1 + \sigma(t))} \varphi(x_1, t), \quad x_1 = x - \eta(t), \quad (1.11)$$

отвечающую переходу в движущуюся систему координат. В (1.11) $\eta(t)$ и $\sigma(t)$ — некоторые, пока неизвестные функции. Для величины φ получаем уравнение

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x_1^2 \varphi + (\ddot{\eta} + \omega^2 \eta - f) x_1 \varphi + \left(\dot{\sigma} - \frac{1}{2} \dot{\eta}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 \eta^2 - f \eta \right) \varphi. \quad (1.12)$$

Отсюда видно, что функция $\varphi(x)$ удовлетворяет уравнению (1.1) с $f=0$ при выполнении условий

$$\left. \begin{aligned} \ddot{\eta} + \omega^2 \eta &= f(t), \quad \eta(-\infty) = \dot{\eta}(-\infty) = 0, \\ \sigma(t) &= \int_{-\infty}^t L(t') dt', \end{aligned} \right\} \quad (1.13)$$

где L — классический лагранжиан:

$$L = \frac{1}{2} \dot{\eta}^2 - \frac{1}{2} \omega^2 \eta^2 + f \eta. \quad (1.14)$$

Таким образом, преобразование волновой функции, включающее $f(t)$ из (1.1), имеет вид

$$\psi(x, t) = \varphi(x - \eta(t)) \exp \left[i \dot{\eta} (x - \eta) + i \int_{-\infty}^t L(\tau) d\tau \right]. \quad (1.15)$$

Комбинируя (1.5) и (1.15), получаем в итоге общее решение уравнения (1.1)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{r(t)}} \exp \left\{ i \left[\dot{\eta}(x - \eta) - \frac{1}{2} a_2(x - \eta)^2 + \sigma \right] \right\} \chi_{-} \left(\frac{x - \eta}{r}, \tau \right). \quad (1.16)$$

Величины $r(t)$, $a_2(t)$, τ , $\eta(t)$ и $\sigma(t)$, входящие в эту формулу, определены выше.

Вещественную величину $\eta(t)$ можно выразить через комплексную величину $\xi(t)$ и через $f(t)$. Запишем для этого выражение для функции Грина уравнения (1.13)

$$G(t, t') = \frac{\xi(t) \xi^*(t') - \xi^*(t) \xi(t')}{W(\xi, \xi^*)} \theta(t - t'), \quad (1.17)$$

где $W(\xi, \xi^*) = \dot{\xi} \xi^* - \xi \dot{\xi}^*$ — вронскиан функций ξ и ξ^* , $\theta(t - t')$ — обычная ступенчатая функция:

$$\theta(x) = 1 \text{ при } x > 0, \quad \theta(x) = 0 \text{ при } x < 0.$$

Отсюда находим

$$\eta(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_-}} (\xi d^* + \xi^* d). \quad (1.18)$$

Здесь введена важная для дальнейшего величина d , равная

$$d(t) = \frac{i}{\sqrt{2\omega_-}} \int_{-\infty}^t \xi(t') f(t') dt'. \quad (1.19)$$

Ее физический смысл состоит в следующем. Перейдем от координаты x и импульса p к безразмерным переменным

$$X = \sqrt{\frac{\omega}{2}} x, \quad P = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} p$$

и положим

$$\alpha = X + iP = \frac{\omega x + ip}{\sqrt{2\omega}} \quad (1.20)$$

(плоскость комплексной переменной α называется фазовой плоскостью). Состояние классического осциллятора в каждый момент времени изображается точкой

на фазовой плоскости. При этом $d(t)$ представляет собой смещение этой точки под действием внешней силы.

В дальнейшем нас будут интересовать вероятности перехода W_{mn} при $t \rightarrow +\infty$, когда частота $\omega(t)$ выходит на постоянное значение ω_+ . При этом выражения для $\xi(t)$ и $\eta(t)$ упрощаются. Из (1.3) имеем

$$\xi(t) = C_1 e^{i\omega_+ t} - C_2 e^{-i\omega_+ t}, \quad |C_1|^2 - |C_2|^2 = \frac{\omega_-}{\omega_+}, \quad (1.3'')$$

где C_1 и C_2 — постоянные, для нахождения которых нужно решить уравнение (1.3) для классического осциллятора во всем интервале $-\infty < t < +\infty$.

Введем величину

$$\rho = \left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2, \quad (1.21)$$

которая при заданном отношении ω_+/ω_- полностью определяет модули коэффициентов C_1 и C_2 :

$$C_1 = e^{i\delta_1} \sqrt{\frac{\omega_-}{\omega_+}} \frac{1}{\sqrt{1-\rho}}, \quad C_2 = e^{i\delta_2} \sqrt{\frac{\omega_-}{\omega_+}} \frac{\sqrt{\rho}}{\sqrt{1-\rho}}. \quad (1.22)$$

Для амплитуды вынужденных колебаний $\eta(t)$ получаем из (1.18):

$$\frac{\omega \eta + i \dot{\eta}}{\sqrt{2\omega}} \Big|_{t \rightarrow \infty} = \sqrt{\frac{\omega_+}{\omega_-}} (C_1^* d - C_2 d^*) e^{-i\omega_+ t}, \quad (1.23)$$

где

$$d = \lim_{t \rightarrow \infty} d(t) = \sqrt{\nu} e^{i\beta}. \quad (1.24)$$

Как будет показано в следующем параграфе, величина $\nu = |d|^2$ характеризует возбуждение осциллятора внешней силой.

§ 2. Квантовый осциллятор под действием внешней силы. Вероятности перехода

Рассмотрим квантовый осциллятор с постоянной частотой при наличии внешней силы $f(t)$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \psi - f x \psi. \quad (2.1)$$

Относительно $f(t)$ мы предположим выполнение граничных условий (1.2). В этом случае при $t \rightarrow \pm \infty$ существуют стационарные состояния

$$\left. \begin{aligned} \varphi_n(x, t) &= \varphi_n(x) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}, \\ \varphi_n(x) &= \left(\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{\omega x^2}{2}} H_n(\sqrt{\omega} x), \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

между которыми происходят переходы. Здесь $H_n(x)$ — полином Эрмита.

Пусть при $t \rightarrow -\infty$ осциллятор находится в n -квантовом состоянии. Тогда при $t \rightarrow +\infty$ его волновая функция имеет вид $\psi_n(x, t) = \sum_m C_{mn} \varphi_m(x, t)$.

Вычислим вероятность перехода $W_{mn} = |C_{mn}|^2$ из состояния $|n\rangle$ в состояние $|m\rangle$. В принципе эта задача могла быть решена следующим образом. В силу (1.15) мы знаем волновую функцию $\psi_n(x, t)$ в любой момент времени t , в том числе и при $t \rightarrow +\infty$. Разлагаем эту функцию по волновым функциям $\varphi_m(x, t)$. Квадраты модулей полученных коэффициентов дают искомые выражения для вероятностей. Этот способ, однако, довольно сложен. Решение задачи можно упростить, вводя производящую функцию

$$\psi(z, x, t) = \sum \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \varphi_n(x, t), \quad (2.3)$$

где z — вспомогательная комплексная переменная, а $\psi_n(x, t)$ — то решение уравнения (2.1), которое при $t \rightarrow -\infty$ переходит в $\varphi_n(x, t)$. Из (2.2) находим $\psi(z, x, t)$ при $t \rightarrow -\infty$:

$$\begin{aligned} \psi(z, x, t) &\rightarrow \psi_\omega(z, x, t) = \\ &= \left(\frac{\omega}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\omega x^2 - 2\sqrt{2\omega} z x e^{-i\omega t} + z^2 e^{-2i\omega t} + i\omega t) \right\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

т. е. $\psi(z, x, t)$ при $t \rightarrow -\infty$ является гауссовским пакетом по переменной x . С помощью (1.15) получаем $\psi(z, x, t)$ при всех значениях t

$$\psi(z, x, t) = \left(\frac{\omega}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (ax^2 - 2bx + c) \right\}, \quad (2.5)$$

где функции a, b, c имеют вид

$$\left. \begin{aligned} a &= \omega, \quad b = \sqrt{2\omega} z e^{-i\omega t} + i\dot{\eta} + \omega\eta, \\ c &= \omega\eta^2 + 2\sqrt{2\omega} z \eta e^{-i\omega t} + z^2 e^{-2i\omega t} + i\omega t - 2i\sigma - i\dot{\eta}\eta. \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

Рассмотрим теперь интеграл

$$I(z_1, z_2, t) = \int dx \psi_\omega^*(z_1^*, x, t) \psi(z_2, x, t). \quad (2.7)$$

При $t \rightarrow +\infty$ он совпадает с производящей функцией для матричных элементов $C_{mn}(t) = \langle \varphi_m(t) | \psi_n(t) \rangle$, $C_{mn} = \lim_{t \rightarrow +\infty} C_{mn}(t)$ *)

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} I(z_1, z_2, t) = F(z_1, z_2) = \sum \frac{z_1^m}{\sqrt{m!}} C_{mn} \frac{z_2^n}{\sqrt{n!}}. \quad (2.7')$$

Переходя в (2.7) к пределу $t \rightarrow +\infty$, получаем **)

$$F(z_1, z_2) = e^{-v/2} e^{z_1 z_2 + V\sqrt{v}(z_1 - z_2)}, \quad (2.8)$$

где v определено формулами (1.24), (1.19).

Вычисление вероятностей W_{mn} сводится теперь к разложению функции $F(z_1, z_2)$ в ряд Тейлора. Введем новые переменные $u = \frac{1}{\sqrt{v}} z_1$, $v = -\frac{1}{\sqrt{v}} z_2$, после чего функция $F(z_1, z_2)$ принимает вид

$$F(z_1, z_2) = e^{-v/2} e^{-v(uv - u - v)}. \quad (2.9)$$

Из (2.9) следует:

$$F(z_1, z_2) = e^{-v/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(v v)^n}{n!} (1-u)^n e^{v u}. \quad (2.10)$$

*) Заметим, что C_{mn} есть не что иное, как матричный элемент оператора смещения $D(\alpha)$ (см. формулу (6.33) гл. I) при $\alpha = d$, т. е. $C_{mn} = \langle m | D(d) | n \rangle$.

**) Интеграл (2.7) легко вычисляется, так как является гауссовским. В $F(z_1, z_2)$ опущен несущественный для дальнейшего фазовый множитель и произведено преобразование переменных $z_k \rightarrow z_k \exp(i\alpha_k)$, где α_1 и α_2 — некоторые фазы. Эти преобразования не сказываются на вероятностях $W_{mn} = |C_{mn}|^2$.

Разлагая полученное выражение в ряд по u , находим

$$F(z_1, z_2) = e^{-v/2} \sum_{m, n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\sqrt{v})^{n-m} L_m^{n-m}(v) z_1^m z_2^n, \quad (2.11)$$

где $L_n^a(x)$ — обобщенные полиномы Лагерра.

На первый взгляд это выражение несимметрично по u и v , однако, используя тождество

$$L_n^{m-n}(x) = \frac{m!}{n!} (-x)^{n-m} L_m^{n-m}(x), \quad (2.12)$$

нетрудно убедиться в том, что на самом деле коэффициенты разложения (2.11) симметричны по m и n . Из сравнения (2.7') и (2.11) с учетом (2.12) находим выражение для вероятностей перехода

$$W_{mn} = \frac{n_{<}!}{n_{>}!} v^k |L_{n_{<}}^k(v)|^2 e^{-v}, \quad k = |n - m|, \quad (2.13)$$

полученное в работе Ю. Швингера (1953). Заметим, что явное выражение для W_{mn} (но в несколько ином виде) было получено впервые в работе Р. Фейнмана (1951).

§ 3. Параметрическое возбуждение квантового осциллятора

Параметрическое возбуждение квантового осциллятора это возбуждение осциллятора при изменении его параметров $m = m(t)$ и $\omega = \omega(t)$. Общий случай переменных во времени $m(t)$ и $\omega(t)$ легко сводится к случаю $m = \text{const}$ с помощью замены $t' = \int \frac{dt}{m(t)}$, $\omega' = m\omega$.

Уравнение (1.1) с $f = 0$ имеет вид

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega^2(t) x^2 \psi. \quad (3.1)$$

Относительно $\omega(t)$ будем предполагать лишь выполнение граничных условий (1.2'). В этом случае при $t \rightarrow \pm \infty$ существуют стационарные состояния

$$\left. \begin{aligned} \varphi_n^{(\pm)}(x, t) &= \varphi_n(x, \omega_{\pm}) e^{-i(n+1/2)\omega_{\pm}t}, \\ \varphi_n(x, \omega) &= \left(\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{\omega x^2}{2}} H_n(\sqrt{\omega} x), \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

между которыми происходят переходы. Мы вычислим вероятность перехода $W_{mn} = |C_{mn}|^2$ из состояния ψ_n в состояние $\varphi_m^{(+)}$. Здесь $C_{mn} = \langle \varphi_m^{(+)} | \psi_n \rangle$, $\psi_n(x, t)$ — состояние, переходящее в $\varphi_n^{(-)}(x, t)$ при $t \rightarrow -\infty$.

Как и в предыдущем параграфе, решение задачи можно упростить, вводя производящую функцию

$$\psi(z, x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x, t), \quad (3.3)$$

где z — вспомогательная комплексная переменная.

Из (3.2) находим

$$\begin{aligned} \psi(z, x, t) \Big|_{t \rightarrow -\infty} &\rightarrow \psi_{\omega_-}(z, x, t) = \\ &= \left(\frac{\omega_-}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\omega_- x^2 - 2\sqrt{2\omega_-} z x e^{-i\omega_- t} + \right. \\ &\quad \left. + z^2 e^{-2i\omega_- t} + i\omega_- t) \right\}, \quad (3.4) \end{aligned}$$

т. е. ψ является гауссовским пакетом по переменной x . С помощью (1.5) находим $\psi(z, x, t)$ при всех значениях t

$$\psi(z, x, t) = \left(\frac{\omega_-}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (ax^2 - 2bx + c) \right\}, \quad (3.5)$$

где функции a , b и c имеют вид

$$a = -i \frac{\xi}{\xi}, \quad b = \sqrt{2\omega_-} \frac{z}{\xi}, \quad c = \frac{\xi^*}{\xi} z^2 + \ln \xi(t), \quad (3.6)$$

$\xi(t)$ определено в (1.3), (1.3').

В частности, разлагая (3.5) по степеням z , получаем вид волновых функций $\psi_n(x, t)$ в любой момент времени:

$$\psi_n(x, t) = \left(\frac{1}{2^n n! \xi(t)} \sqrt{\frac{\omega_-}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-in\varphi} e^{-\frac{ax^2}{2}} H_n \left(\sqrt{\omega_-} \frac{x}{|\xi|} \right). \quad (3.7)$$

Заметим, что $a_1(t) = \text{Re } a(t) = \omega_- |\xi(t)|^{-2}$; этим обеспечивается правильная нормировка волновых функций $\psi_n(x, t)$.

Рассмотрим теперь интеграл

$$J(z_1, z_2, t) = \int dx \psi_{\omega_+}^*(z_1^*, x, t) \psi(z_2, x, t). \quad (3.8)$$

При $t \rightarrow +\infty$ он совпадает с производящей функцией для матричных элементов

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} J(z_1, z_2, t) = G(z_1, z_2) = \sum_{m, n=0}^{\infty} \frac{z_1^m}{\sqrt{m!}} C_{mn} \frac{z_2^n}{\sqrt{n!}}. \quad (3.9)$$

Интеграл в (3.8) является гауссовским и легко

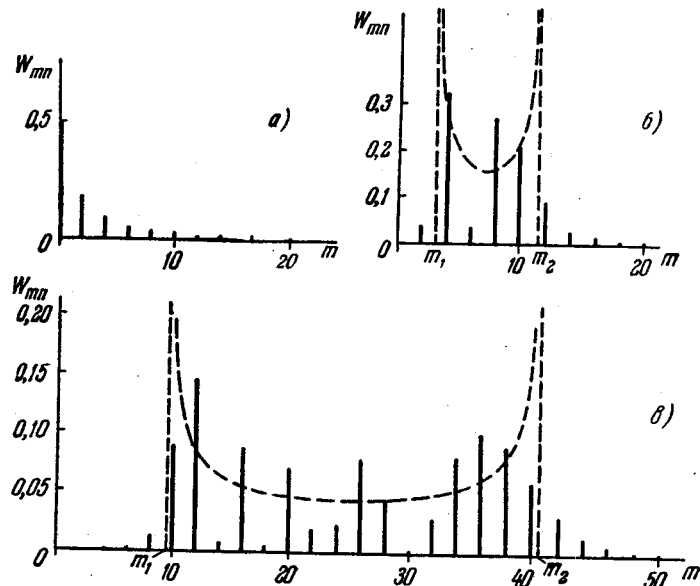


Рис. 19.

вычисляется. Переходя к пределу $t \rightarrow +\infty$ и учитывая примечание **) на стр. 247, получаем

$$G(z_1, z_2) = (1 - \rho)^{1/4} \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[\sqrt{\rho} (z_2^2 - z_1^2) + 2 \sqrt{1 - \rho} z_1 z_2 \right] \right\}. \quad (3.10)$$

Параметр ρ определен в (1.21). При этом значение ρ целиком определяется видом $\omega(t)$ и не зависит от внеш-

ней силы. Вычисление коэффициентов C_{mn} свелось, таким образом, к разложению функции $G(z_1, z_2)$ в ряд Тейлора. Отсылая за деталями вычислений к работе В. С. Попова и А. М. Переломова (1969), приведем окончательную формулу для вероятностей перехода

$$W_{mn} = \frac{n_{<}!}{n_{>}!} \sqrt{1 - \rho} \left| P_{\frac{m-n}{2}}^{\frac{m+n}{2}} (\sqrt{1 - \rho}) \right|^2. \quad (3.11)$$

Здесь $n_{<} = \min(m, n)$, $n_{>} = \max(m, n)$, $P_n^m(x)$ — присоединенная функция Лежандра. Таким образом, вероятность перехода W_{mn} полностью определяется одним параметром ρ , для нахождения которого достаточно решить уравнение (1.3) для классического осциллятора. Графики вероятностей перехода при различных значениях n и ρ приведены на рис. 19:

- а) для $n = 0$, $\rho = 0,75$;
- б) для $n = 6$, $\rho = 0,11$;
- в) для $n = 20$, $\rho = 0,12$.

Отметим некоторые особенности выражения (3.11).

1. Переходы совершаются между состояниями $|n, \omega_{-}\rangle$ и $|m, \omega_{+}\rangle$, для которых числа m и n имеют одинаковую четность. Это очевидным образом связано с четностью потенциала $V(x, t) = \frac{1}{2} \omega^2(t) x^2$.

2. Особый интерес представляет величина $\Delta_n = 1 - W_{nn}$, дающая вероятность того, что осциллятор изменит свое начальное состояние. Графики функций $\Delta_n = \Delta_n(\rho)$ приведены на рис. 20. Из этого рисунка видно, что адиабатическое приближение для вероятностей перехода W_{mn} справедливо лишь при выполнении условий: $\rho \ll 1$, $m\rho \ll 1$.

3. Выражение (3.11) для W_{mn} сильно упрощается при $n = 0, 1$ (в этих случаях переходы происходят

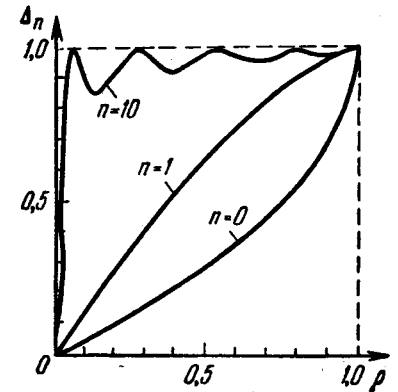


Рис. 20.

только вверх, $m \geq n$):

$$W_{2n,0} = \frac{(2n)!}{2^{2n} (n!)^2} \sqrt{1-\rho} \rho^n, \quad W_{2n+1,1} = \frac{(2n+1)!}{2^{2n} (n!)^2} (1-\rho)^{1/2} \rho^n. \quad (3.12)$$

4. В противоположном случае, когда $n \gg 1$ (и ρ не слишком мало), в (3.11) можно подставить квазиклассическую асимптотику для функций Лежандра. Считая m непрерывной переменной, преобразуем (3.11) к виду

$$W_{mn} = \frac{4}{\pi} \frac{\cos^2 \Phi_{mn}}{\sqrt{(m-m_1)(m_2-m)}}, \quad (3.13)$$

где

$$m_1 = n \frac{1-\sqrt{\rho}}{1+\sqrt{\rho}}, \quad m_2 = n \frac{1+\sqrt{\rho}}{1-\sqrt{\rho}},$$

а Φ_{mn} — быстро осциллирующая фаза. Множитель 4 в (3.13) обусловлен тем, что величина m изменяется на 2, $\Delta m = 2$ (см. п. 1); с учетом этого распределение W_{mn} нормировано на единицу. Усредненное по осцилляциям распределение вероятностей показано на рис. 19, б и в штриховой линией. Распределение вероятностей перехода W_{mn} в основном сосредоточено в области $m_1 < m < m_2$ (для того чтобы разность $m_2 - m_1 \gg 1$, требуется $n^2 \rho \gg 1$). При $m < m_1$ вероятности W_{mn} экспоненциально падают с уменьшением m ; аналогично обстоит дело и при $m > m_2$. Эти области значений m вносят пренебрежимо малый вклад в полную вероятность. Максимального значения вероятности перехода W_{mn} достигают при m , близких к m_1 и m_2 (см. рис. 19). Сравнение с формулами (3.12) и (3.13) показывает существенное различие в поведении вероятностей W_{mn} при $n \sim 1$ и $n \gg 1$. Это различие ясно видно из рис. 19, а, в.

5. Параметр ρ , являющийся характеристикой классического осциллятора, совпадает с квантовомеханическим коэффициентом отражения от одномерного потенциального барьера, для которого импульс частицы $k(x) = \omega(x)$. Это обстоятельство, на которое обратил внимание Л. П. Питаевский, позволяет использовать для нахождения ρ уже известные результаты квантовой механики. Подробнее эта аналогия рассмотрена в следующем параграфе (см. формулы (4.12), (4.13)). Здесь мы ограничимся несколькими примерами, когда уравне-

ние (1.3) решается точно, а также рассмотрим особенно интересный случай параметрического резонанса.

А. Пусть

$$\omega^2(t) = \omega_-^2 + \frac{\omega_+^2 - \omega_-^2}{1 + e^{-2\gamma t}} + \frac{a\gamma^2}{(e^{\gamma t} + e^{-\gamma t})^2} \quad (3.14)$$

(такая зависимость $\omega^2(t)$ отвечает известному из квантовой механики потенциалу Экарта; графики этой функции при различных значениях параметра a приведены на рис. 21). При

этом $a > -\left(\frac{\omega_+ + \omega_-}{\gamma}\right)^2$, иначе $\omega^2(t)$ принимает отрицательные значения. Функция $\omega(t)$ обладает минимумом при $-a_0 < a < -a_1$, максимумом — при $a > a_1$, а при $|a| \leq a_1$ монотонно изменяется от ω_- до ω_+ (здесь

$$a_0 = \left(\frac{\omega_+ + \omega_-}{\gamma}\right)^2, \\ a_1 = \left(\frac{\omega_+^2 - \omega_-^2}{\gamma^2}\right)^2.$$

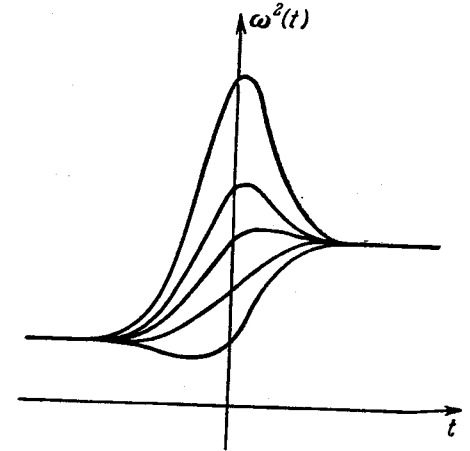


Рис. 21.

Коэффициент отражения для (3.14) равен (К. Экарт, 1930)

$$\rho = \frac{\operatorname{ch}(\alpha - \beta) + \cos \delta}{\operatorname{ch}(\alpha + \beta) + \cos \delta}, \quad \alpha = \pi \frac{\omega_-}{\gamma}, \quad \beta = \pi \frac{\omega_+}{\gamma}, \quad \delta = \pi \sqrt{a+1}. \quad (3.15)$$

Б. С помощью (3.14) можно совершить непрерывный переход из адиабатической области к резкому скачку $\omega(t)$. Полагая $a = 0$, имеем

$$\rho = \left[\frac{\operatorname{sh}(\alpha - \beta)/2}{\operatorname{sh}(\alpha + \beta)/2} \right]^2 = \begin{cases} \exp\left(-2\pi \frac{\omega_-}{\gamma}\right) & \text{при } \gamma \ll \omega_{\pm}, \\ \left(\frac{\omega_+ - \omega_-}{\omega_+ + \omega_-}\right)^2 \left[1 - \frac{\pi^2 \omega_+ \omega_-}{3\gamma^2} + \dots\right] & \text{при } \gamma \gg \omega_{\pm}. \end{cases} \quad (3.16)$$

Значение $\rho = \left(\frac{\omega_+ - \omega_-}{\omega_+ + \omega_-} \right)^2$ соответствует резкому скачку частоты и может быть получено методом внезапных возмущений.

В. Как видно из формул теории возмущений, заметного возрастания ρ можно ожидать в том случае, когда спектр $\omega(t)$ содержит компоненту с удвоенной частотой $2\omega_0$. Это случай параметрического резонанса. Полагая $\omega^2(t) = \omega_0^2 [1 + 2\varepsilon \sin(2 + \delta)\omega_0 t]$, где $|\varepsilon|, |\delta| \ll 1$, находим

$$\rho = \begin{cases} \frac{\varepsilon^2 \operatorname{sh}^2 \tau}{4\mu^2 + \varepsilon^2 \operatorname{sh}^2 \tau} & \text{при } |\varepsilon| > |\delta|, \\ \frac{\varepsilon^2 \sin^2 \tau}{4\mu^2 + \varepsilon^2 \sin^2 \tau} & \text{при } |\varepsilon| < |\delta| \end{cases} \quad (3.17)$$

(здесь $\mu = \frac{1}{2} \sqrt{|\varepsilon^2 - \delta^2|}$, $\tau = \mu\omega_0 t$). При $|\varepsilon| > |\delta|$ (область неустойчивости для уравнения Матье) ρ монотонно возрастает от 0 до 1. При $|\varepsilon| < |\delta|$ решение носит колебательный характер, и максимальное значение $\rho_{\max} = \left(\frac{\varepsilon}{\delta} \right)^2 < 1$. В обоих случаях возможно сильное возбуждение осциллятора ($\rho \sim 1$) при столь угодно малых значениях коэффициентов ε и δ . Этот пример может служить моделью квантового параметрического усилителя (с одной модой).

Г. Подчеркнем, что в формулу (3.11) для W_{mn} входит лишь модуль отношения C_2/C_1 , но не его фаза. Так будет не всегда. Рассмотрим, например, эволюцию когерентного состояния (подробнее о свойствах когерентных состояний см. § 6 гл. I)

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (3.18)$$

$$\langle x | \alpha \rangle = \psi_\alpha(x) = \left(\frac{\omega_-}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\omega_- x^2 - 2\sqrt{2\omega_-} \alpha x + \alpha^2 + |\alpha|^2] \right\}. \quad (3.19)$$

Сравнение с (3.4) показывает, что $\psi_\alpha(x, t \rightarrow -\infty)$ с точностью до постоянного множителя $\exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)$ совпадает с производящей функцией $\psi(\alpha, x, t \rightarrow -\infty)$.

Поэтому и при любом t

$$\psi_\alpha(x, t) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \psi(\alpha, x, t), \quad (3.20)$$

где $\psi(\alpha, x, t)$ дается формулой (3.4). Поскольку $a(t) \neq \omega(t)$ (даже при $t \rightarrow \infty$), то состояние $\psi_\alpha(x, t)$ при $t \neq -\infty$ уже не является когерентным. Распределение по уровням при $t \rightarrow +\infty$ становится стационарным:

$$\left. \begin{aligned} W_0(\alpha) &= \sqrt{1-\rho} \exp \left\{ -[1 - \sqrt{\rho} \cos 2(\varphi - \delta)] r^2 \right\}, \\ W_m(\alpha) &= W_0(\alpha) \frac{\rho^{m/2}}{2^{m/2} m!} \left| H_m \left(\sqrt{\frac{1-\rho}{2\rho}} r e^{i(\varphi-\delta)} \right) \right|^2. \end{aligned} \right\} \quad (3.21)$$

Здесь $H_m(x)$ — полином Эрмита,

$$\alpha = r e^{i\varphi}, \quad \frac{C_2}{C_1} = \sqrt{\rho} e^{2i\delta}. \quad (3.22)$$

В отличие от (3.11), распределение $W_m(\alpha)$ не определяется одним лишь ρ , но зависит и от фазы отношения C_2/C_1 . В этом проявляется квазиклассичность когерентного состояния.

В адиабатической области ($\rho \rightarrow 0$) эта формула упрощается:

$$W_m(\alpha) = e^{-r^2} \frac{r^{2m}}{m!} \left[1 + \sqrt{\rho} \left(r^2 - \frac{m(m-1)}{r^2} \right) \cos 2(\varphi - \delta) \right]. \quad (3.23)$$

Д. В качестве последнего примера рассмотрим осциллятор, который при $t = 0$ находится в состоянии теплового равновесия при температуре T и потому описывается матрицей плотности

$$\rho_{mn}(0) = (1 - \zeta) \zeta^n \delta_{mn}, \quad \zeta = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right), \quad (3.24)$$

k — постоянная Больцмана (распределение Планка). В этом случае при $t \rightarrow +\infty$ населенности W_n равны

$$\begin{aligned} W_n &= \rho_{nn} = \\ &= (1 - \zeta) \zeta^n \sqrt{\frac{1-\rho}{1-\rho\zeta^2}} \frac{(1-\rho\zeta^{-2})}{(1-\rho\zeta^2)} P_n \left(\frac{1-\rho}{\sqrt{(1-\rho\zeta^2)(1-\rho\zeta^{-2})}} \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Поскольку начальное состояние (3.24) является некогерентной смесью n -квантовых состояний, то фаза отношения C_2/C_1 в (3.25) не входит.

§ 4. Осциллятор с переменной частотой под действием внешней силы, вероятности перехода

Рассмотрим общий случай, когда на осциллятор с переменной частотой $\omega(t)$ действует сила $f(t)$. Уравнение Шредингера в этом случае имеет вид (1.1). Относительно величин $\omega(t)$ и $f(t)$ предположим лишь выполнение естественных граничных условий (1.2) и (1.2'). В остальном зависимость частоты $\omega(t)$ и силы $f(t)$ от времени может быть произвольной. Для того чтобы получить явное выражение для вероятностей W_{mn} , воспользуемся, так же как и в предыдущих параграфах, методом производящих функций. Пусть $\psi_n(x, t)$ — то решение уравнения (1.1), которое при $t \rightarrow -\infty$ переходит в $\varphi_n(x, t; \omega_-)$, а z — вспомогательная комплексная переменная. Образует производящую функцию

$$\psi(z, x, t) = \sum \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x, t). \quad (4.1)$$

Тогда с помощью формулы (1.16) нетрудно найти $\psi(z, x, t)$ в любой момент времени t

$$\begin{aligned} \psi(z, x, t) = & \left(\frac{1}{\xi(t)} \sqrt{\frac{\omega_-}{\pi}} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[a(x - \eta)^2 - \frac{2\sqrt{2\omega_-}}{\xi} (x - \eta)z + \right. \right. \\ & \left. \left. + z^2 e^{-2i\gamma} \right] + i[\dot{\eta}(x - \eta) + \sigma] \right\}. \quad (4.2) \end{aligned}$$

Здесь $\xi(t)$ и $\eta(t)$ — решения уравнений движения для классического осциллятора, определенные в (1.3), (1.3'), (1.13); $\gamma(t) = \arg \xi(t)$, величина $\sigma(t)$ дается формулой (1.13).

Рассмотрим интеграл

$$I(z_1, z_2; t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{\omega_+}^*(z_1^*, x, t) \psi(z_2, x, t). \quad (4.3)$$

При $t \rightarrow +\infty$ он совпадает с производящей функцией для матричных элементов $C_{mn} = \langle m, \omega_+ | \psi_n(t) \rangle$

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow +\infty} I(z_1, z_2; t) = & H(z_1, z_2) = \sum_{m, n=0}^{\infty} \frac{z_1^m}{\sqrt{m!}} \langle m, \omega_+ | \psi_n(t) \rangle \frac{z_2^n}{\sqrt{n!}}. \quad (4.4) \end{aligned}$$

Опуская, как и прежде, несущественный для дальнейшего фазовый множитель и производя преобразование переменных $z_k \rightarrow z_k e^{i\alpha_k}$, где α_1 и α_2 — некоторые фазы, после ряда преобразований получаем следующее выражение для $H(z_1, z_2)$ (А. М. Переломов, В. С. Попов, 1970):

$$\begin{aligned} H(z_1, z_2) = & (1 - \rho)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\nu}{2} (1 - \sqrt{\rho} \cos 2\varphi) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} [\sqrt{\rho} (z_2^2 - z_1^2) + 2\sqrt{1 - \rho} z_1 z_2] + \right. \\ & \left. + \sqrt{\nu} [\sqrt{1 - \rho} e^{-i\varphi} z_1 - (e^{i\varphi} - \sqrt{\rho} e^{-i\varphi}) z_2] \right\}. \quad (4.5) \end{aligned}$$

Параметр ρ в (4.5) дается формулой (1.21). При этом $0 \leq \rho < 1$ и значение ρ целиком определяется видом $\omega(t)$ и не зависит от внешней силы. Величина $\nu = |d|^2$ характеризует степень возбуждения осциллятора внешней силой и определяется формулами (1.19), (1.24). Фаза φ имеет следующий вид:

$$\varphi = \frac{\delta_1 + \delta_2}{2} - \beta, \quad (4.6)$$

где δ_1 , δ_2 и β — фазы величин C_1 , C_2 и d .

Вычисление вероятностей W_{mn} сводится теперь к разложению функции $H(z_1, z_2)$ в ряд Тейлора; коэффициенты разложения C_{mn} можно выразить через полиномы Эрмита от двух переменных. Согласно справочнику Г. Бейтман, А. Эрдейи (1953В) эти многочлены определяются так:

$$\exp \left\{ \sum_{i, j=1}^2 a_{ij} \left(y_i z_j - \frac{1}{2} z_i z_j \right) \right\} = \sum_{n_1, n_2} \frac{z_1^{n_1} z_2^{n_2}}{n_1! n_2!} H_{n_1, n_2}(y_1, y_2). \quad (4.7)$$

В нашем случае

$$[a_{ij}] = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho}, & -\sqrt{1-\rho} \\ -\sqrt{1-\rho}, & -\sqrt{\rho} \end{pmatrix}, \quad y_1 = \sqrt{\nu(1-\rho)} e^{i\varphi}, \\ y_2 = -\sqrt{\nu}(e^{-i\varphi} - \sqrt{\rho} e^{i\varphi}) \quad (4.8)$$

(заметим, что $a^2 = I$, $a^{-1} = a$). Отсюда находим окончательное выражение для вероятностей перехода

$$W_{mn} = \frac{\sqrt{1-\rho}}{m!n!} |H_{mn}(y_1, y_2)|^2 \exp\{-\nu(1 - \sqrt{\rho} \cos 2\varphi)\}. \quad (4.9)$$

Приведем в явном виде W_{mn} для простейших значений m и n :

$$\left. \begin{aligned} W_{00} &= \sqrt{1-\rho} \exp\{-\nu(1 - \sqrt{\rho} \cos 2\varphi)\}, \\ W_{10} &= \nu(1-\rho) W_{00}, \quad W_{01} = \nu(1 - 2\sqrt{\rho} \cos 2\varphi + \nu^2\rho) W_{00}, \\ W_{11} &= (1-\rho)[(1-\nu)^2 + 2\nu(1-\nu)\sqrt{\rho} \cos 2\varphi + \nu^2\rho] W_{00}. \end{aligned} \right\} \quad (4.10)$$

Если в (4.7) положить одну из переменных z_1, z_2 равной нулю, то это выражение упрощается и принимает вид производящей функции для обычных полиномов Эрмита. Отсюда следует, что если при $t \rightarrow -\infty$ осциллятор не возбужден ($n=0$), то величины W_{m0} выражаются через обычные полиномы Эрмита:

$$W_{m0} = \frac{\sqrt{1-\rho}}{2^m m!} \rho^{m/2} \left| H_m \left(\frac{\sqrt{2\nu(1-\rho)} e^{-i\varphi}}{\sqrt{\rho}} \right) \right|^2 \times \\ \times \exp\{-\nu(1 - \sqrt{\rho} \cos 2\varphi)\}. \quad (4.11)$$

Аналогичная формула имеет место для W_{0n} :

$$W_{0n} = \frac{\sqrt{1-\rho}}{2^n n!} \rho^{n/2} \left| H_n \left(\frac{\sqrt{2\nu}(\sqrt{\rho} e^{-i\varphi} - e^{i\varphi})}{\sqrt{\rho}} \right) \right|^2 \times \\ \times \exp\{-\nu(1 - \sqrt{\rho} \cos 2\varphi)\}. \quad (4.11')$$

Из явного вида формул (4.11), (4.11') видно, что, вообще говоря, $W_{0n} \neq W_{n0}$. В то же время при $\nu=0$, т. е. при отсутствии внешней силы величины W_{mn} сим-

метричны по m и n . Заметим, что из общих принципов квантовой механики следует, что вероятности перехода W_{mn} симметричны по начальному n и конечному m состояниям, если $\omega(-t) = \omega(t)$. Как видно из (3.11), фактически равенство $W_{mn} = W_{nm}$ в этом случае выполняется при произвольной зависимости ω от t . Причину этой дополнительной симметрии можно понять, если, следуя Л. П. Питаевскому, связать ρ с коэффициентом отражения от одномерного барьера. Для этого образуем из $\xi(t)$ и $\xi^*(t)$ линейную комбинацию $\xi_1(t)$ со следующими свойствами:

$$\xi_1(t) = \xi(t) + R\xi^*(t) = \begin{cases} e^{i\omega-t} + Re^{-i\omega-t} & \text{при } t \rightarrow -\infty, \\ De^{i\omega+t} & \text{при } t \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (4.12)$$

Отсюда видно, что $\xi_1(t)$ совпадает с волновой функцией одномерного уравнения Шредингера, если заменить t на x , а $\omega(t)$ на $k(x)$. Коэффициенты R и D имеют смысл амплитуд отраженной и проходящей волн. Из сравнения (4.12) с (1.3'') находим

$$C_1 = \frac{D}{1-|R|^2}, \quad C_2 = \frac{RD^*}{1-|R|^2}, \quad \rho = |R|^2. \quad (4.13)$$

Таким образом, решение (4.12) соответствует волне, падающей на барьер слева. Обращение времени $t \rightarrow -t$ отвечает переходу к волне, падающей справа. Обозначая коэффициенты отражения для этих двух волн через ρ и ρ' , имеем $W_{mn}(\rho) = W_{nm}(\rho')$. Но, как известно (Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, 1963), $\rho' = \rho$, отсюда и вытекает дополнительная симметрия вероятностей W_{mn} по индексам m и n . Из формул (2.13), (2.12) видно, что величины W_{mn} симметричны по m и n также при $\rho=0$. Если же $\nu \neq 0$ и $\rho \neq 0$, то для того, чтобы выяснить, когда такая симметрия существует, рассмотрим случай

$$\omega(-t) = \omega(t), \quad f(-t) = f(t). \quad (4.14)$$

Уравнению (1.3) удовлетворяет при этом не только $\xi(t)$, но и $\xi(-t)$. Отсюда следует, что $\xi(-t)$ является линейной комбинацией $\xi(t)$ и $\xi(t)^*$. Нетрудно проверить, устремляя, например, t к $-\infty$, что

$$\xi(-t) = C_1 \xi^*(t) - C_2 \xi(t). \quad (4.15)$$

Устремляя теперь в (4.15) t к $+\infty$, получаем следующие соотношения между коэффициентами:

$$C_1(C_2 + C_2^*) = 0, \quad |C_1|^2 + C_2^2 = 1. \quad (4.16)$$

Из (4.16) следует, что C_2 должна быть чисто мнимой величиной. Поскольку $f(-t) = f(t)$, то в выражение (1.19) для d при $t \rightarrow +\infty$ входит величина $\xi(t) + \xi(-t) = (1 - C_2)\xi(t) + C_1\xi^*(t)$. Аргумент этой величины

$$\arg[\xi(t) + \xi(-t)] = \frac{1}{2}[\arg(1 - C_2) + \arg C_1] \quad (4.17)$$

оказывается не зависящим от времени. Отсюда находим

$$\beta = \arg d = \frac{\pi}{2} + \frac{1}{2}[\arg(1 - C_2) + \arg C_1] \quad (4.18)$$

и

$$\varphi = \frac{1}{2}[\arg C_1 + \arg C_2] - \beta = \frac{1}{2}[\arg C_2 - \arg(1 - C_2) - \pi]. \quad (4.19)$$

Заметим, что из определения $\rho = \left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2$ и (4.16) следует, что $C_2 = \pm i \frac{\sqrt{\rho}}{\sqrt{1-\rho}}$. Подставляя это значение C_2 в (4.19), приходим к равенству

$$\cos 2\varphi = \sqrt{\rho}. \quad (4.20)$$

Таким образом, в рассматриваемом случае переменные ρ и φ уже не являются независимыми, а вероятности W_{mn} определяются уже двумя величинами ρ и ν и симметричны по m и n . Заметим, что во всех остальных случаях симметрия по m и n заведомо нарушается.

§ 5. Квантовый осциллятор и адиабатические инварианты

Начнем, следуя П. Парадоксову (1966), с рассмотрения классического осциллятора $\ddot{x} + \omega^2(t)x = 0$, частота которого $\omega(t)$ медленно меняется с течением времени. Это может быть, например, тяжелый маятник с медленно изменяющейся длиной подвеса l . Его частота $\omega = \sqrt{g/l}$, где g — ускорение силы тяжести. В квантовой

теории его энергия принимает значения $(n + 1/2)\hbar\omega$, где n — целое число, номер состояния.

Очевидно, что при медленном изменении система, находившаяся в n -квантовом состоянии, останется в n -м состоянии и номер n не изменится. Это формулировка адиабатической инвариантности в квантовой механике. Она справедлива и при $n = 0$ или $n = 1$ для молекулы и для $n = 10^{30}$ (порядок величины n для маятника стальных часов).

Ясно, что независимо от значения постоянной \hbar и конкретной величины n при адиабатическом изменении ω получается $E = \text{const } \omega$.

В классической механике доказательство этого равенства сложнее. При произвольном виде потенциала более сложном чем $\omega^2 x^2/2$, можно применить то же самое рассуждение, только номер уровня надо будет искать иначе. Ограничимся одномерной задачей. Стационарные волновые функции финитного движения (т. е. колебаний) вещественны. Волновая функция n -го состояния имеет n узлов, т. е. n точек обращения в нуль. Это значит, что в той области, в которой происходят колебания, укладывается n полувольт.

Длина дебройлевской волны равна $2\pi\hbar/p$, где p — импульс ($p = mv$), а число волн в сантиметре равно $p/2\pi\hbar$. При колебаниях импульс не остается постоянным, значит, надо интегрировать при подсчете числа волн, укладывающихся на длине, от одной точки до другой:

$$n(\text{волн}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p dx.$$

Нам нужно найти число узлов, т. е. число полувольт, которое, очевидно, вдвое больше. Принято не просто умножать интегралы на 2, а писать номер уровня в виде

$$n = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p dx,$$

где интегрирование проводится по замкнутому циклу. В данном случае цикл — это путь от x_1 до x_2 плюс обратный путь от x_2 до x_1 , так что интеграл удваивается.

Итак, адиабатическим инвариантом классической механики при медленном изменении потенциала является величина $\oint p dx$, поскольку \hbar и n постоянны. Так квантовая механика помогает понять выводы классической механики.

Исторический ход развития теории адиабатических инвариантов был, однако, совсем иным. Адиабатические инварианты классической механики были известны задолго до создания квантовой теории. В «старой» квантовой теории Бора — Зоммерфельда (до работ Гейзенберга и Шредингера) использовали классические адиабатические инварианты именно потому, что их размерность (импульс, умноженный на координату) совпадает с размерностью постоянной Планка.

Адиабатическая инвариантность важна не только для колебательных систем. Важнейшим примером является движение заряженной частицы в магнитном поле; мы ограничимся ссылкой на очень наглядную, ясно изложенную работу Т. Нортропа и Э. Теллера (1960).

Отметим, что квантовые представления позволяют лучше понять также условия применимости и точность выполнения адиабатической инвариантности. Так, в случае гармонического осциллятора воздействие, заключающееся в изменении ω с течением времени, симметрично по отношению к началу координат (замена x на $-x$). Ясно, что такое воздействие не меняет четности функций, а следовательно, номер уровня n может меняться только на 2, 4, ...

Отсюда ясно, что вероятность переходов, т. е. нарушение адиабатической инвариантности (равносильной $n = \text{const}$, см. выше) зависит от фурье-компонент частоты 2ω в законе изменения $\omega(t)$, поскольку система потребляет энергию порциями при переходах $n \rightarrow n \pm 2$. Отсюда следуют оценки зависимости точности инварианта от вида $\omega(t)$. Здесь же содержится и параметрический резонанс; если $\omega(t)$ зависит от времени по закону $\omega = \omega_0(1 + \hbar \cos 2\omega_0 t)$ переходы и накачка энергии особенно интенсивны.

На этом мы закончим качественный разбор адиабатических инвариантов и перейдем к количественным

оценкам. В квантовом случае естественно определить адиабатический инвариант I как среднее значение оператора $H(t)/\omega(t)$:

$$I(t) = \left\langle \frac{H(t)}{\omega(t)} \right\rangle = \sum_n \left(n + \frac{1}{2} \right) |C_n|^2, \quad (5.1)$$

$$\text{если } |\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |n, \omega(t)\rangle.$$

Аналогом адиабатических инвариантов, как уже говорилось выше, является также распределение по уровням энергий. Вопрос о точности сохранения адиабатических инвариантов в квантовом случае рассматривался в работах А. М. Дыхне (1960) и Х. Льюиса и В. Ризенфельда (1969). Использование явной формулы (3.11) для вероятностей перехода для квантового осциллятора позволяет уточнить их результаты.

Рассмотрим сначала случай, когда первоначальное состояние является n -квантовым. В адиабатическом случае, когда $\omega(t)$ — медленно меняющаяся функция, аналитическая в некоторой полосе $|\text{Im } t| \leq \epsilon$, величина ρ экспоненциально мала. При этом из (3.11) получаем

$$\left. \begin{aligned} W_{nn} &= 1 - \frac{1}{2}(n^2 + n + 1)\rho + \dots, \\ W_{mn} &= \frac{n_{>}!}{2^{2k} k!^2 n_{<}!} \rho^k \left[1 - \left(1 + \frac{n_{<}(n_{>} + 1)}{k+1} \right) \frac{\rho}{2} + \dots \right], \\ k &= \frac{1}{2} |m - n|. \end{aligned} \right\} \quad (5.2)$$

Главные члены в этом разложении были получены А. М. Дыхне (1960). Поправка имеет порядок $n^2\rho$, поэтому с ростом начального возбуждения n точность формул (5.2) быстро ухудшается. При $n \gg 1$ может осуществиться случай, когда $\rho \ll 1$, а $n^2\rho \gg 1$, тогда в (5.2) нужно произвести суммирование всех членов ряда, что дает

$$W_{mn} = \frac{n_{>}!}{(mn)^k n_{<}!} |J_k(\sqrt{mnr})|^2 \quad (5.3)$$

(условия применимости этой формулы $m, n \gg 1$). Если $mnr \ll 1$, то (5.3) автоматически переходит в (5.2).

В простейшем случае $m = n$ формулу (5.3) можно обобщить на произвольное значение ρ . Применяя асимптотику Хильба (см. Г. Бейтман, А. Эрдейи, 1953А) для $P_n(\cos \theta)$, находим из (3.11)

$$W_{nn} = \frac{\theta}{\operatorname{tg} \theta} \left| J_0 \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) \theta \right) \right|^2. \quad (5.4)$$

Здесь $n \gg 1$, а $\rho = \sin^2 \theta$ — любое.

Перейдем к рассмотрению общего случая, когда состояние осциллятора задается матрицей плотности $\hat{\rho}(t)$. Запишем матрицу плотности начального состояния в форме так называемого P -представления (условия, при выполнении которых можно использовать это представление, обсуждаются в книге Дж. Клаудера и Е. Сударшана (1968)):

$$\hat{\rho}(0) = \int d^2\alpha P(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (5.5)$$

где $P(\alpha)$ — весовая функция, $|\alpha\rangle$ — волновая функция когерентного состояния. Тогда при любом t

$$\hat{\rho}(t) = \int d^2\alpha P(\alpha) |\psi_\alpha(t)\rangle \langle \psi_\alpha(t)|, \quad (5.6)$$

где $\psi_\alpha(t)$ определяется формулами (3.20) и (3.4). Отсюда для произвольного оператора \hat{A} имеем

$$\bar{A} = S\rho \{ \hat{\rho}(t) \hat{A} \} = \int d^2\alpha P(\alpha) \langle \psi_\alpha(t) | \hat{A} | \psi_\alpha(t) \rangle. \quad (5.7)$$

Таким образом, достаточно усреднить \hat{A} по состояниям $|\psi_\alpha(t)\rangle$. После несложных вычислений находим с помощью (5.7)

$$\bar{n}_- = |\alpha|^2, \quad \bar{n}_+ = \frac{\rho}{1-\rho} + |\alpha|^2 \frac{1+\rho-2\sqrt{\rho} \cos 2(\varphi-\delta)}{1-\rho} \quad (5.8)$$

(здесь \bar{n}_\pm — средние значения $\hat{n} = a^\dagger a$ при $t \rightarrow \pm \infty$, для состояния $\psi_\alpha(t)$, $\alpha = |\alpha| e^{i\psi}$, а φ определено в (3.22)). Из (5.7), (5.8) следует

$$\varepsilon = \frac{I_+ - I_-}{I_-} = \frac{2\rho}{1-\rho} - \frac{2\sqrt{\rho}}{1-\rho} \operatorname{Re} \left(e^{2i\delta} \frac{A}{B} \right), \quad (5.9)$$

где I_\pm — значения адиабатического инварианта I при $t \rightarrow \pm \infty$

$$A = \langle a^{+2} \rangle = \int d^2\alpha P(\alpha) \alpha^{*2}, \quad B = I_- = \int d^2\alpha P(\alpha) \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right). \quad (5.9')$$

Из соотношения неопределенностей вытекает, что $|A| \leq \leq \sqrt{B^2 - 1/4}$. Поэтому величина ε всегда заключена в пределах

$$-\frac{2\sqrt{\rho}}{1+\sqrt{\rho}} < \varepsilon < \frac{2\sqrt{\rho}}{1-\sqrt{\rho}}. \quad (5.10)$$

Если начальное состояние стационарное, то $P(\alpha, t_0) = = P(|\alpha|, t_0)$, откуда $A = 0$; следовательно,

$$\frac{I_+ - I_-}{I_-} = \frac{2\rho}{1-\rho}, \quad I_+ = \frac{1+\varepsilon}{1-\rho} \left\langle \hat{n} + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (5.11)$$

(независимо от конкретного вида этого состояния). В частности, формула (5.11) справедлива для всех n -квантовых состояний. При $n = 0, 1$ в этом нетрудно убедиться непосредственно из распределений (3.12).

Как видно из (5.10) и (5.11), в среднем $I_+ > I_-$. Причину возрастания I легко понять, рассмотрев осциллятор с медленно меняющейся частотой. Пусть $\omega = = \omega_0 + \Delta\omega$, $\Delta\omega \ll \omega_0$. Усредняя это равенство по возмущенным волновым функциям, учтем, что, согласно теореме вириала, $\bar{p}^2 = \omega_0^2 \bar{x}^2 = \omega_0 I_0$, откуда

$$I = I_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \right)^2 \right\} > I_0.$$

Аналогичным способом можно находить средние и для операторов, более сложных чем \hat{n} . Мы приведем выражение для дисперсии $\Delta n_+^2 = (\bar{n}^2 - \bar{n}^2)$. При этом, поскольку общая формула имеет несколько громоздкий вид, ограничимся случаем стационарного состояния $P(\alpha, t_0) = = P(|\alpha|, t_0)$. Тогда

$$\Delta n_+^2 = \frac{1+4\rho+\rho^2}{(1-\rho)^2} \Delta n_-^2 + \frac{2\rho}{(1-\rho)^2} [\bar{n}^2 + \bar{n}_- + 1]. \quad (5.12)$$

Если изменение частоты $\omega(t)$ происходит адиабатически, то $\rho \rightarrow 0$. В этом случае формулы (5.9), (5.12) принимают более простой вид:

$$\varepsilon = -2 \operatorname{Re} \left(\frac{A}{B} R \right), \quad \Delta n_+^2 = \Delta n_-^2 + 2\rho (3 \Delta n_-^2 + \bar{n}_-^2 + \bar{n}_- + 1), \quad (5.13)$$

где $R = \sqrt{\rho} e^{2i\delta}$ — коэффициент отражения.

Заметим, что ε , вообще говоря, не определяется одним лишь коэффициентом отражения R , но зависит и от выбора начального состояния. Так, если взять в качестве начального состояния осциллятора когерентное состояние $|\alpha\rangle$, где $\alpha = |\alpha| e^{i\varphi}$, то при $|\alpha| \gg 1$

$$\frac{A}{B} = \frac{2|\alpha|^2}{1+2|\alpha|^2} e^{-2i\varphi} \rightarrow e^{-2i\varphi}$$

$$\varepsilon = -2 \sqrt{\rho} \cos 2(\delta - \varphi).$$

§ 6. Квазиэнергия системы, подвергающейся периодическому воздействию

Рассмотрим квантовую систему, на которую действует сила, периодически меняющаяся во времени. Обычно в качестве нулевого приближения рассматривается система с потенциалом, не зависящим от времени; состояния такой системы, обладающие определенной энергией, образуют полный ортонормальный набор. Зависящая от времени часть гамильтониана $H_1 \ll H_0$ рассматривается как возмущение, вызывающее переходы между собственными состояниями гамильтониана H_0 .

Однако если H_1 не мало, то целесообразен иной подход (Я. Б. Зельдович, 1965).

Согласно теоретико-групповым соображениям, если $H = H_0 + H_1$ периодически зависит от времени, то среди решений уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad H(t+T) = H(t) \quad (6.1)$$

можно выбрать $\psi_\alpha(t)$ такие, что

$$\psi_\alpha(t+T) = e^{-i\varepsilon_\alpha T} \psi_\alpha(t). \quad (6.2)$$

По аналогии со случаем не зависящего от времени H естественно назвать квазиэнергией *) величину

$$\varepsilon = \frac{\hbar \alpha}{T}, \quad T = \frac{2\pi}{\omega}. \quad (6.3)$$

Состояния такого типа в случае периодически зависящего от времени $H(t)$ играют ту же роль, что и стационарные состояния с определенной энергией в обычной теории.

При этом, однако, коэффициенты разложения заданной волновой функции $\psi(x)$ по состояниям $\psi_\alpha(x, t)$ зависят от времени t , меняясь периодически (с периодом T). Напротив, если взять произвольное точное решение $\psi(x, t)$ уравнения Шредингера с данным $H(t)$, то его коэффициенты разложения по $\psi_\alpha(x, t)$ постоянны.

Решения, соответствующие разным квазиэнергиям, как и в теории с постоянным H , ортогональны между собой. В этом легко убедиться, заметив, что для любых двух решений $\psi_1(x, t)$ и $\psi_2(x, t)$ уравнения Шредингера с произвольно зависящим от времени гамильтонианом $H(t)$ в силу его эрмитовости скалярное произведение $(\psi_2(t), \psi_1(t))$ не зависит от времени. Если в качестве волновой функции выбрать состояние с определенной квазиэнергией ε , то ее можно записать в виде

$$\psi_\varepsilon(x, t) = u_\varepsilon(x, t) e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}, \quad u_\varepsilon(x, t+T) = u_\varepsilon(x, t). \quad (6.4)$$

Поэтому для двух квазиэнергий ε_1 и ε_2 , если $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \neq m\hbar\omega$, где m — целое число, независимость от времени требует ортогональности функций $\psi_{\varepsilon_1}(t)$ и $\psi_{\varepsilon_2}(t)$ в любой данный момент времени t :

$$\int dx \psi_{\varepsilon_2}^*(x, t) \psi_{\varepsilon_1}(x, t) = 0. \quad (6.5)$$

Для случая $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = m\hbar\omega$ заметим, что суперпозиция таких решений есть также решение с той же квазиэнергией (определенной, как легко видеть, с точностью до аддитивной постоянной $m\hbar\omega$). Благодаря этому

*) Сравните также с понятием квазиимпульса частицы в периодическом (в пространстве) потенциале кристаллической решетки.

ψ_{e_1} и ψ_{e_2} при $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + m\hbar\omega$ всегда можно ортогонализировать в полном соответствии со случаем постоянного H .

Приведем простой пример состояний с определенной квазиэнергией. При рассмотрении ионизации атомов в поле сильной световой волны (Л. В. Келдыш, 1964) конечное состояние электрона описывается волновой функцией

$$\psi_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp \left\{ i \left[\boldsymbol{\pi}(t) \mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_0^t \boldsymbol{\pi}^2(t') dt' \right] \right\}, \quad (6.6)$$

где $\boldsymbol{\pi}(t) = \mathbf{p} - \mathbf{A}(t)$, $\mathbf{A}(t)$ — векторный потенциал, $\mathbf{F}(t) = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ — напряженность электрического поля (которое считается однородным). Состояния ψ_p при $\mathbf{F} \rightarrow 0$ переходят в обычные плоские волны, а в периодическом поле $\mathbf{F}(t)$ описывают движение со средним (по периоду T) импульсом \mathbf{p} и квазиэнергией ε_p :

$$\varepsilon_p = \frac{1}{2} (\mathbf{p}^2 + p_0^2), \quad p_0^2 = \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{A}^2(t') dt' \quad (6.7)$$

(член $p_0^2/2$ соответствует средней кинетической энергии осцилляций в поле $\mathbf{F}(t)$). Явное нахождение ψ_p и ε_p в этом примере возможно по той причине, что мы пренебрегли атомным потенциалом $V(\mathbf{r})$, действующим на электрон помимо внешнего поля $\mathbf{F}(t)$. В противном случае определение спектра квазиэнергий представляет собой сложную задачу, которая рассматривалась лишь в рамках теории возмущений (В. И. Ритус, 1966). Мы покажем, что для гармонического осциллятора спектр квазиэнергий может быть найден точно (А. М. Переломов, В. С. Попов, 1969).

Рассмотрим сначала осциллятор с постоянной частотой ω_0 , на который действует периодическая внешняя сила $f(t)$:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left[\frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 - f(t)x \right] \psi, \quad f(t+T) = f(t). \quad (6.8)$$

Общее решение этого уравнения дается формулой (1.15). Чтобы получить из (1.15) состояние с определенной ква-

зиэнергией, наложим на $\eta(t)$ требование периодичности (этим $\eta(t)$ определяется однозначно), а в качестве $\varphi(x, t)$ возьмем волновую функцию n -го уровня. Тогда

$$\psi_n(x, t) = \varphi_n(x - \eta(t), \omega_0) \exp \left\{ -i \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \omega_0 t - \frac{1}{2} \int_0^t f \eta dt' \right] \right\}, \quad (6.9)$$

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega_0 - \frac{1}{2T} \int_0^T f(t) \eta(t) dt, \quad (6.10)$$

$$\varphi_n(x, \omega_0) = \left(\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\omega_0}{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \omega_0 x^2} H_n(\sqrt{\omega_0} x). \quad (6.11)$$

Состояния $\psi_n(x, t)$ образуют полную систему функций и при данном t взаимно ортогональны. Физически они соответствуют осциллятору, мгновенное положение равновесия которого находится в точке $\eta(t)$ и периодически колеблется.

Из (6.10) следует, что спектр квазиэнергий остается эквидистантным, испытывая лишь общее смещение $\Delta\varepsilon$. Полагая

$$f(t) = \sum_n f_n e^{in\omega t}, \quad f_{-n} = f_n^*, \quad (6.12)$$

находим

$$\Delta\varepsilon = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|f_n|^2}{n^2 \omega^2 - \omega_0^2}. \quad (6.13)$$

В частности, при $f(t) = f \cos \omega t$, $\Delta\varepsilon = \frac{f^2}{4(\omega^2 - \omega_0^2)}$. В этом

случае $\Delta\varepsilon < 0$ при $\omega < \omega_0$, $\Delta\varepsilon > 0$ при $\omega > \omega_0$. Сдвиг $\Delta\varepsilon$ при $\omega \rightarrow 0$ соответствует эффективному понижению дна потенциальной ямы*). В случае высоких частот ($\omega \gg \omega_0$) имеем: $\Delta\varepsilon = \frac{f^2}{4\omega^2}$, что соответствует кинетической энергии быстрых осцилляций частицы.

*) Сдвиг уровней осциллятора в постоянном поле F равен $\Delta\varepsilon = -F^2/2\omega_0^2$. Полагая $F(t) = f \cos \omega t$ и усредняя по периоду, находим в адиабатическом приближении: $\Delta\varepsilon = -f^2/4\omega_0^2$.

Более интересен случай осциллятора с переменной частотой: $\omega(t+T) = \omega(t)$. Уравнение (3.1) имеет решение вида $\psi = \exp\left\{-\frac{1}{2}(ax^2 - 2bx + c)\right\}$, если a , b и c удовлетворяют уравнениям (К. Хусими, 1953)

$$i\dot{a} = a^2 - \omega^2, \quad i\dot{b} = ab, \quad i\dot{c} = b^2 - a. \quad (6.14)$$

Положим

$$a = a_1 + ia_2, \quad b = \sqrt{2a_1}ze^{-i\gamma}, \quad c = z^2e^{-2i\gamma} - \frac{1}{2}\ln a_1 + i\gamma, \quad (6.15)$$

где z — вспомогательная переменная, а a_1 , a_2 , γ — неизвестные функции времени. Уравнения для них следуют из (6.14):

$$\frac{1}{2}\frac{\ddot{a}_1}{a_1} - \frac{3}{4}\left(\frac{\dot{a}_1}{a_1}\right)^2 + a_1^2 = \omega^2(t), \quad a_2 = \frac{\dot{a}_1}{2a_1}, \quad \dot{\gamma} = a_1. \quad (6.16)$$

Удобно выразить a_1 , a_2 , γ в параметрической форме. Пусть $\xi_1(t)$, $\xi_2(t)$ — независимые решения классического уравнения движения $\ddot{\xi} + \omega^2(t)\xi = 0$. Тогда

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2i}\left(\frac{\xi_1}{\xi_1} - \frac{\xi_2}{\xi_2}\right), & a_2 &= -\frac{1}{2}\left(\frac{\xi_1}{\xi_1} + \frac{\xi_2}{\xi_2}\right), \\ a &= a_1 + ia_2 = -i\frac{\xi_1}{\xi_1}, & \gamma &= -\frac{i}{2}\ln\frac{\xi_1}{\xi_2}, \end{aligned} \right\} \quad (6.17)$$

$\psi(z, x, t) =$

$$= \left(\frac{a_1}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{1}{2}[ax^2 - 2\sqrt{2a_1}zxe^{-i\gamma} + z^2e^{-2i\gamma} + i\gamma]\right\}. \quad (6.18)$$

Но, с другой стороны, $\psi(z, x, t)$ является производящей функцией

$$\psi(z, x, t) = \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x, t),$$

где $\psi_n(x, t)$ — решение уравнения (3.1) с $\omega(t+T) = \omega(t)$. Отсюда получаем

$$\psi_n(x, t) = \varphi_n(x, a_1(t)) \exp\left\{-\frac{i}{2}[a_2x^2 + (2n+1)\gamma]\right\}. \quad (6.19)$$

Покажем теперь, что $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$ можно подобрать таким образом, чтобы состояния $\psi_n(x, t)$ имели определен-

ную квазиэнергию. Согласно теореме Флоке (см., например, «Механику» Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица, 1958)

$$\xi_1(t) = e^{i\lambda t}u_1(t), \quad \xi_2(t) = e^{-i\lambda t}u_2(t) \quad (6.20)$$

(u_1, u_2 — периодические функции с периодом T). При этом λ может быть либо вещественным (зона устойчивости), либо чисто мнимым (зона неустойчивости). Подчеркнем, что для определения λ достаточно решить уравнение (1.3) для классического осциллятора. В зоне устойчивости $\xi_2(t) = \xi_1^*(t)$ и функции a_1, a_2, γ вещественны, причем

$$a_1(t+T) = a_1(t), \quad a_2(t+T) = a_2(t), \quad \gamma(t+T) = \gamma(t) + \lambda T, \quad (6.21)$$

а

$$\lambda = \frac{1}{T} \int_0^T a_1(t) dt = \frac{\text{Im}(\dot{\xi}_1 \xi_1^*)}{T} \int_0^T \frac{dt}{|\xi_1|^2} \quad (6.22)$$

($\text{Im}(\dot{\xi}_1 \xi_1^*)$ не зависит от времени).

Заметим теперь, что волновая функция (6.18) имеет смысл лишь при $a_1 > 0$, а знаки a_1 и λ совпадают. Поэтому в качестве $\xi_1(t)$ необходимо выбрать решение с $\lambda > 0$. Из (6.19) и (6.21) получаем, что состояния $\psi_n(x, t)$ имеют квазиэнергию

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\lambda. \quad (6.23)$$

Спектр квазиэнергий эквидистантный, но величина «кванта» λ сложным образом зависит от вида $\omega(t)$. Для нахождения λ достаточно решить уравнение движения классического осциллятора с частотой $\omega(t)$.

Переход в зону неустойчивости совершаем с помощью (6.19). Нетрудно показать, что функция вида (6.19) удовлетворяет уравнению (3.1), если

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{a_1^2}{2}x^2\right)\Phi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)a_1\Phi_n. \quad (6.24)$$

В зоне неустойчивости $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$ вещественны. Положим поэтому $a_1 = -i\alpha$, $\gamma = -i\gamma'$ и сделаем замену

$(n + 1/2) \rightarrow iv$. После этой замены эффективный потенциал в (6.24) принимает вид $V(x) = -\frac{1}{2} \alpha^2 x^2$, что приводит к непрерывному спектру $-\infty < v < \infty$. Каждое собственное значение двукратно вырождено.

Приведем явное выражение для волновых функций с квазиэнергией $\varepsilon_v = v|\lambda|$:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_v^{(\pm)} &= \exp\left[-\frac{i}{2} a_2 x^2 - iv\gamma'\right] \Phi_v^{(\pm)}(x, t), \\ \Phi_v^{(+)} &= D_{-\frac{1}{2}+iv} \left(x \sqrt{2\alpha} e^{-i\frac{\pi}{4}}\right), \\ \Phi_v^{(-)} &= D_{-\frac{1}{2}-iv} \left(-x \sqrt{2\alpha} e^{i\frac{\pi}{4}}\right). \end{aligned} \right\} \quad (6.25)$$

Здесь $D_{-\frac{1}{2}+iv}$ — функции параболического цилиндра (Г. Бейтман, А. Эрдейи, 1953); при этом $\Phi_v^{(+)}$ отвечает волне, падающей слева *):

$$\Phi_v^{(+)}(x) \sim \begin{cases} \left(e^{\frac{ix^2}{2}} + A_1 e^{-\frac{ix^2}{2}}\right) |x|^{-\frac{1}{2}+iv} & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ A_2 e^{\frac{ix^2}{2}} x^{-\frac{1}{2}+iv} & \text{при } x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (6.26)$$

Значение λ определяется тем, что $\xi_1(t+T) = e^{\lambda T} \xi_1(t)$.

Волновые функции $\Psi_v(x, t)$ не отвечают связанному состоянию, что качественно согласуется с поведением классического осциллятора в зоне неустойчивости (неограниченный рост амплитуды колебаний $\xi(t)$ при параметрическом резонансе). Следует отметить, что мгновенное значение потенциала $V(x, t)$ (или его среднее по периоду) имеет вид $V = \frac{1}{2} kx^2$, с $k > 0$, что в стационарном случае приводит лишь к дискретному спектру. Поэтому возникновение непрерывного спектра обязано исключительно временным осцилляциям $V(x, t)$.

*) При $x \rightarrow \pm\infty$ $|\Psi_v(x, t)| \sim |x|^{-1/2}$, что можно понять из простых классических соображений. В области неустойчивости $x(t) \sim e^{\lambda t}$, и время пребывания частицы на отрезке dx равно

$$dt = \frac{dx}{|x|} \sim |\Psi_v(x)|^2 dx.$$

Особая ситуация возникает на границе между областями устойчивости и неустойчивости $\lambda = 0$. В этом случае одно из решений ξ_1, ξ_2 периодическое, а другое растет $\sim t$. Здесь также можно получить явное выражение для волновых функций с определенной квазиэнергией. Эти функции взаимно ортогональны (при одном и том же t) и образуют полную систему. Спектр квазиэнергий двукратно вырожден и непрерывно заполняет полуось $0 \leq \varepsilon < \infty$.

В заключение заметим, что рассмотренные выше состояния с определенной квазиэнергией допускают простую теоретико-групповую интерпретацию. Читателя, интересующегося этим вопросом, мы отсылаем к работе А. М. Переломова и В. С. Попова (1969).

§ 7. Гейзенберговское представление и канонические преобразования

До сих пор мы рассматривали шредингеровское представление, т. е. такое представление, когда операторы, соответствующие физическим величинам, не зависят от времени, а вся зависимость от времени средних значений физических величин определяется волновыми функциями. Во многих случаях, однако, удобнее использовать такое представление, когда вся зависимость от времени средних значений определяется операторами, а волновые функции от времени не зависят. Это представление называется гейзенберговским. Переход к нему осуществляется с помощью формулы

$$A(t) = \hat{S}^+(t) A \hat{S}(t), \quad (7.1)$$

где унитарный оператор $\hat{S}, \hat{S}^{-1} = \hat{S}^+$, называемый S -матрицей, есть оператор, переводящий волновую функцию $\psi(0)$ в волновую функцию $\psi(t)$ *):

$$\psi(t) = \hat{S}(t) \psi(0). \quad (7.2)$$

*) В этом параграфе в качестве начального момента времени t выбирается $t_0 = 0$. Переход к случаю $t_0 \rightarrow -\infty$, использованному в предыдущих параграфах, производится элементарно.

Отсюда следует уравнение для $\hat{S}(t)$

$$i \frac{d\hat{S}}{dt} = H(t) \hat{S}, \quad \hat{S}(0) = 1 \quad (7.3)$$

и уравнение движения для $A(t)$

$$i \frac{dA}{dt} = [A(t), H(t)], \quad A(0) = A, \quad H(t) = \hat{S}^+(t) H \hat{S}(t). \quad (7.4)$$

Уравнения (7.4) представляют сложные нелинейные операторные уравнения и лишь в редких случаях их удается решить точно. В случае осциллятора эти уравнения для операторов $x(t)$ и $p(t)$ превращаются в линейные и притом полностью совпадают с классическими уравнениями движения. В силу этого гейзенберговское представление удобно использовать при рассмотрении осциллятора. Пусть сначала на осциллятор с постоянной частотой действует внешняя сила $f(t)$, произвольным образом зависящая от времени. Для оператора $a(t) = \hat{S}^+(t) a \hat{S}(t)$ из (7.4) получаем следующее уравнение:

$$i\dot{a}(t) = \omega a(t) - \frac{f(t)}{\sqrt{2\omega}}, \quad a(0) = a. \quad (7.5)$$

Решая его, находим

$$a(t) = (a + d(t)) e^{-i\omega t}, \quad (7.6)$$

где

$$d(t) = \frac{i}{\sqrt{2\omega}} \int_0^t e^{i\omega t'} f(t') dt'. \quad (7.7)$$

Отсюда сразу же следует, что если при $t = 0$ состояние было когерентным: $|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$, то с точностью до фазового множителя оно остается когерентным:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\sigma(t)} (\alpha + d(t)) e^{-i\omega t}. \quad (7.8)$$

Из (7.6) видно, что учет силы приводит к дополнительному (по сравнению с умножением на $e^{-i\omega t}$) преобразованию операторов

$$b = \hat{a} + d, \quad b^+ = \hat{a}^+ + d^*. \quad (7.9)$$

Соотношения (7.9) определяют простейшее каноническое преобразование, т. е. такое преобразование, которое не меняет перестановочных соотношений ($[b, b^+] = 1$).

Сравнение с формулой (6.38) гл. I показывает, что оператор \hat{b} получается из оператора \hat{a} с помощью унитарного преобразования

$$\hat{b} = D^+(d) a D(d), \quad D(d) = e^{da^+ - d^*a}, \quad D^+D = DD^+ = 1. \quad (7.10)$$

Равенства (7.10) являются весьма частным следствием теоремы И. фон Неймана (1931), которая утверждает, что при любом каноническом преобразовании операторов $a_1, \dots, a_N \rightarrow b_1, \dots, b_N$, $[b_i, b_j] = \delta_{ij}$ в случае конечного N эти операторы унитарно эквивалентны, т. е. существует унитарный оператор U ($U^+U = UU^+ = 1$) такой, что

$$b_i = U^+ a_i U, \quad b_i^+ = U^+ a_i^+ U. \quad (7.10')$$

Подчеркнем, что в случае бесконечного числа степеней свободы ($N = \infty$) теорема фон Неймана уже несправедлива. Это значит, что существуют канонические преобразования, которые не являются унитарно эквивалентными. Простой пример унитарно неэквивалентных представлений будет дан ниже.

Рассмотрим преобразование (7.9) более подробно. С помощью операторов a и a^+ построим гильбертово пространство \mathcal{H} , базис которого образуют состояния

$$|n\rangle = \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad a|0\rangle = 0. \quad (7.11)$$

Поскольку операторы b, b^+ удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и операторы a, a^+ , то аналогичным образом можно построить пространство $\tilde{\mathcal{H}}$ с базисом

$$|\tilde{n}\rangle = \frac{b^{+n}}{\sqrt{n!}} |\tilde{0}\rangle, \quad b|\tilde{0}\rangle = 0. \quad (7.12)$$

В силу унитарной эквивалентности операторов a и b переход от пространства \mathcal{H} к $\tilde{\mathcal{H}}$ дается унитарным преобразованием

$$|\tilde{n}\rangle = D^+(d) |n\rangle, \quad |n\rangle = D(d) |\tilde{n}\rangle, \quad |\tilde{0}\rangle = |-d\rangle. \quad (7.13)$$

Таким образом, коэффициенты разложения состояния $|\tilde{n}\rangle$ по состояниям $|m\rangle$ совпадают с матричными элементами оператора $D^+(d)$

$$\langle m|\tilde{n}\rangle = \langle m|D^+(d)|n\rangle = D_{mn}(-d), \quad \langle 0|\tilde{0}\rangle = e^{-\frac{|d|^2}{2}}. \quad (7.14)$$

Эти матричные элементы несущественно отличаются от введенных в § 2 величин C_{mn} . Явное выражение для C_{mn} дается формулами (2.7'), (2.11). Использование гейзенберговского представления дает возможность получить эти формулы чисто алгебраическим способом. Образум производящую функцию для величин $\langle m|\tilde{n}\rangle$:

$$\tilde{F}(\beta, \alpha) = \sum \frac{\beta^m}{\sqrt{m!}} \langle m|\tilde{n}\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}. \quad (7.15)$$

Вычисляя суммы по m и n , получаем

$$\tilde{F}(\beta, \alpha) = \langle 0|e^{\beta a} e^{\alpha b^+}|\tilde{0}\rangle. \quad (7.16)$$

Поскольку $\langle 0|a^+ = 0$ и $b|\tilde{0}\rangle = 0$, то удобно выразить операторы a и b^+ через операторы b и a^+ , $a = b - d$ и $b^+ = a^+ + d^*$, после чего приходим к формуле

$$\tilde{F}(\beta, \alpha) = e^{\alpha d^* - \beta d} \langle 0|e^{\beta b} e^{\alpha a^+}|\tilde{0}\rangle. \quad (7.17)$$

Из тождества (6.34) гл. I вытекает соотношение

$$e^{\beta b} e^{\alpha a^+} = e^{\alpha\beta [b, a^+]} e^{\alpha a^+} e^{\beta b} = e^{\alpha\beta} e^{\alpha a^+} e^{\beta b}, \quad (7.18)$$

с помощью которого получаем

$$\tilde{F}(\beta, \alpha) = e^{\alpha d^* - \beta d + \alpha\beta} \langle 0|\tilde{0}\rangle = e^{-\frac{|d|^2}{2}} e^{\alpha\beta + \alpha d^* - \beta d}. \quad (7.19)$$

Сравнение с формулой (2.8) показывает, что

$$F(z_1, z_2; d) = \tilde{F}(z_1 e^{i \arg d}, z_2 e^{-i \arg d}; -d). \quad (7.20)$$

Таким образом, функция $\tilde{F}(z_1, z_2)$ несущественно отличается от функции $F(z_1, z_2)$, и, разлагая ее в ряд по степеням z_1 и z_2 , приходим к формуле, аналогичной (2.11).

Перейдем теперь к рассмотрению случая осциллятора с переменной частотой. Уравнения для операторов $x(t)$ и $p(t)$ имеют в этом случае вид

$$\dot{x} = p, \quad \dot{p} = -\omega^2 x, \quad (7.21)$$

откуда

$$\ddot{x} + \omega^2(t)x = 0. \quad (7.22)$$

Таким образом, уравнения для гейзенберговских операторов $x(t)$ и $p(t)$ имеют тот же вид, что и для классического осциллятора, и потому *)

$$\left. \begin{aligned} x(t) &= C_{11}(t)x(0) + C_{12}p(0), \\ p(t) &= C_{21}(t)x(0) + C_{22}(t)p(0), \end{aligned} \right\} \quad (7.23)$$

где $C_{ij}(t)$ — вещественные функции времени. Их можно выразить через функцию $\xi(t)$, удовлетворяющую уравнению $\ddot{\xi} + \omega^2 \xi = 0$ и начальным условиям $\xi(0) = 1$, $\dot{\xi}(0) = i\omega_-$:

$$\left. \begin{aligned} C_{11} &= \frac{1}{2}(\xi + \xi^*), & C_{12} &= \frac{1}{2i\omega_-}(\xi - \xi^*), \\ C_{21} &= \dot{C}_{11}, & C_{22} &= \dot{C}_{12}. \end{aligned} \right\} \quad (7.24)$$

Обозначим через $\hat{a}(t)$ гейзенберговский оператор, удовлетворяющий начальному условию

$$\hat{a}(0) = a(\omega_-); \quad (7.25)$$

здесь $a(\omega)$ — оператор в шредингеровском представлении:

$$a(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(\omega x + ip).$$

Из (7.23) и (7.25) вытекает, что

$$\hat{a}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_-}}(\omega_- x(t) + ip(t)). \quad (7.26)$$

Отсюда следует, что

$$\left. \begin{aligned} \hat{a}(t) &= u'(t)\hat{a}(0) + v'(t)\hat{a}^+(0), \\ \hat{a}^+(t) &= v^*(t)\hat{a}(0) + u^*(t)\hat{a}^+(0), \end{aligned} \right\} \quad (7.27)$$

*) Аналогичные формулы имеют место и для системы N связанных между собой осцилляторов. Заметим, что преобразование координат $x_i(t)$ и импульсов $p_i(t)$ при произвольном N является линейным и оставляет неизменной билинейную антисимметричную форму $x'_i p_i - p'_i x_i$. Такие преобразования образуют группу вещественных симплектических матриц $Sp(2N, R)$ порядка $2N$. В случае $N = 1$, как видно из (7.23), это преобразование входит в группу $SL(2, R)$, т. е. группу вещественных матриц с определителем, равным единице. Это является спецификой простейшего случая $N = 1$. Как известно из теории групп, все три группы $Sp(2, R)$, $SL(2, R)$ и $SU(1, 1)$ изоморфны между собой.

где

$$u'(t) = \frac{1}{2} \left(\xi^*(t) + \frac{i}{\omega_-} \dot{\xi}^*(t) \right), \quad v'(t) = \frac{1}{2} \left(\xi(t) + \frac{i}{\omega_-} \dot{\xi}(t) \right). \quad (7.27')$$

Поскольку коммутатор $[a(t), a^+(t)] = 1$ и не зависит от t , то $|u'|^2 - |v'|^2 = 1$ (в чем нетрудно убедиться и непосредственной проверкой). Отсюда следует, что преобразование (7.27) (обозначим его через $S(t)$ без «крышки») является каноническим и принадлежит группе $SU(1, 1)$, т. е. группе матриц второго порядка с определителем 1, оставляющих инвариантной квадратичную форму $|z_1|^2 - |z_2|^2$.

Введем теперь преобразование \hat{T} , соответствующее изменению частоты у осцилляторных функций: $\hat{T}\psi_n(\omega_-) = \psi_n(\omega_+)$. Нетрудно видеть, что соответствующее преобразование операторов T также входит в группу $SU(1, 1)$:

$$\begin{aligned} a(\omega_+) &= u''a(\omega_-) + v''a^+(\omega_-), \\ a^+(\omega_+) &= v''a(\omega_-) + u''a^+(\omega_-), \end{aligned} \quad (7.28)$$

где

$$u'' = \frac{\omega_+ + \omega_-}{2\sqrt{\omega_+\omega_-}}, \quad v'' = \frac{\omega_+ - \omega_-}{2\sqrt{\omega_+\omega_-}}.$$

Матричный элемент перехода $|n, \omega_- \rangle \rightarrow |m, \omega_+ \rangle$ принимает теперь вид

$$C_{mn}(t) = \langle m, \omega_+ | \psi_n(t) \rangle = \langle m, \omega_- | \hat{T}^+ \hat{S}(t) | n, \omega_- \rangle. \quad (7.29)$$

Поскольку состояния в обкладках относятся к одной частоте ω_- , то (7.29) представляет собой матричный элемент конечного «поворота» для группы $SU(1, 1)$.

Произвольное преобразование из $SU(1, 1)$ определяется тремя параметрами α_1 , β и α_2 , причем квадрат матричного элемента зависит лишь от параметра β

$$\left. \begin{aligned} u(\alpha_1, \beta, \alpha_2) &= \begin{pmatrix} u & v \\ v^* & u^* \end{pmatrix}, \\ u &= \operatorname{ch} \frac{\beta}{2} e^{\frac{i}{2}(\alpha_1 + \alpha_2)}, \quad v = \operatorname{sh} \frac{\beta}{2} e^{\frac{i}{2}(\alpha_1 - \alpha_2)} \end{aligned} \right\} \quad (7.30)$$

(область изменения параметров: $0 \leq \alpha_1, \alpha_2 < 2\pi$, $-\infty < \beta < +\infty$). Перемножая S и T^+ , находим значения u и v , отвечающие преобразованию $\hat{U} = \hat{T}^+ \hat{S}$:

$$u = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_+}{\omega_-}} \left(\xi^* + \frac{i}{\omega_+} \dot{\xi}^* \right), \quad v = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\omega_+}{\omega_-}} \left(\xi + \frac{i}{\omega_+} \dot{\xi} \right). \quad (7.31)$$

В частности, при $t \rightarrow \infty$

$$\left. \begin{aligned} |u| &= \sqrt{\frac{\omega_+}{\omega_-}} |C_1| = \frac{1}{\sqrt{1-\rho}}, \quad |v| = \sqrt{\frac{\rho}{1-\rho}}, \\ \operatorname{th} \frac{\beta}{2} &= \sqrt{\rho}. \end{aligned} \right\} \quad (7.32)$$

Таким образом, мы пришли к необходимости рассмотрения канонического преобразования *)

$$\left. \begin{aligned} b &= ua + va^+, \quad |u|^2 - |v|^2 = 1, \\ b^+ &= v^*a + u^*a^+, \quad \rho = \frac{|v|^2}{|u|^2}. \end{aligned} \right\} \quad (7.33)$$

Дальнейшие построения во многом аналогичны тем, которые использовались при рассмотрении канонического преобразования смещения. В частности, с помощью формул (7.11) и (7.12) можно построить два гильбертовых пространства \mathcal{H} и $\tilde{\mathcal{H}}$, причем здесь имеют место формулы, аналогичные (7.13) и (7.14) (нужно лишь \hat{D} заменить на \hat{U}). Нетрудно также найти выражение для операторов a и b^+ через b и a^+ :

$$a = \frac{1}{u} b - \frac{v}{u} a^+, \quad b^+ = \frac{v^*}{u} b + \frac{1}{u} a^+. \quad (7.34)$$

*) По поводу этой формулы заметим следующее. В развитой Н. Н. Боголюбовым (1947) теории сверхтекучести слабо неидеального бозе-газа рассматривается каноническое преобразование (7.33) от операторов частиц (a, a^+) к операторам квазичастиц (b, b^+). Волновые функции с определенными числами частиц φ_m и квазичастиц ψ_n имеют вид

$$\varphi_m = \frac{1}{\sqrt{m!}} a^{+m} \varphi_0, \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} b^{+n} \psi_0$$

и вполне аналогичным состояниям $|m, \omega_+ \rangle$ и $|n, \omega_- \rangle$ для осциллятора. Поэтому разложение функции ψ_n по функциям φ_m математически эквивалентно рассмотренной выше задаче. В частности, выражение (3.11) при $\rho = |v|^2/|u|^2$ дает квадрат соответствующего коэффициента этого разложения.

Для производящей функции $G(\beta, \alpha)$ матричных элементов U_{mn} получаем

$$\tilde{G}(\beta, \alpha) = \langle 0 | e^{\beta \left(\frac{1}{u} b - \frac{v}{u} a^+ \right)} e^{\alpha \left(\frac{v^*}{u} b + \frac{1}{u} a^+ \right)} | \tilde{0} \rangle. \quad (7.35)$$

С помощью тождества (6.34) гл. I находим

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\beta, \alpha) &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \beta^2 \frac{v}{u^2} [a^+, b] \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \alpha^2 \frac{v^*}{u^2} [a^+, b] \right\} \times \\ &\quad \times \langle 0 | e^{\frac{\beta}{u} b} e^{\frac{\alpha}{u} a^+} | \tilde{0} \rangle = \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{v^*}{u} \alpha^2 - \frac{v}{u} \beta^2 + 2 \frac{1}{u} \alpha \beta \right] \right\} \langle 0 | \tilde{0} \rangle. \quad (7.36) \end{aligned}$$

Переходя в (7.36) к новым переменным $z_1 = e^{-\frac{i\alpha_1}{2}} \alpha$, $z_2 = e^{-\frac{i\alpha_2}{2}} \beta$ (α_1 и α_2 определены в (7.30)), приходим к уже рассмотренной ранее формуле (3.10)

$$G \left(e^{-\frac{i\alpha_1}{2}} \beta, e^{-\frac{i\alpha_2}{2}} \alpha \right) = \tilde{G}(\beta, \alpha). \quad (7.37)$$

Вводя обозначение $\sqrt{1-\rho} = \cos \theta$ и разлагая выражение, стоящее в экспоненте, на линейные множители, получаем

$$\begin{aligned} G(\beta, \alpha) &= \\ &= \exp \left\{ \left(\cos \frac{\theta}{2} \alpha - \sin \frac{\theta}{2} \beta \right) \left(\sin \frac{\theta}{2} \alpha + \cos \frac{\theta}{2} \beta \right) \right\} \langle 0 | \tilde{0} \rangle. \quad (7.38) \end{aligned}$$

Таким образом,

$$G(\beta, \alpha) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha'^k \beta'^k}{k!} \langle 0 | \tilde{0} \rangle, \quad (7.39)$$

где

$$\alpha' = \cos \frac{\theta}{2} \alpha - \sin \frac{\theta}{2} \beta, \quad \beta' = \sin \frac{\theta}{2} \alpha + \cos \frac{\theta}{2} \beta. \quad (7.40)$$

Но (7.40) можно интерпретировать как преобразование спинора $(\alpha, \beta) \rightarrow (\alpha', \beta')$ при повороте на угол θ вокруг оси y (см., например, «Квантовую механику» Л. Д. Лан-

дау и Е. М. Лифшица, 1963), а величину $\frac{\alpha'^k \beta'^k}{k!}$ — как волновую функцию частицы со спином $s = k$ и проекцией спина на ось z $\mu = 0$. С другой стороны, как хорошо известно, такие величины при повороте преобразуются с помощью так называемых D -функций, откуда следует

$$e^{\alpha \beta'} = \sum_{s=\frac{m+n}{2}, \mu=\frac{n-m}{2}} D_{\mu, 0}^s(\cos \theta) \frac{\beta^m \alpha^n}{\sqrt{m!} \sqrt{n!}}. \quad (7.41)$$

Вспоминая определение $G(\beta, \alpha)$, получаем

$$\begin{aligned} \langle m | \tilde{n} \rangle &= \langle m | U^+ | n \rangle = e^{i\varphi} D_{\frac{n-m}{2}, 0}^{\frac{n+m}{2}}(\cos \theta) \langle 0 | U^+ | 0 \rangle = \\ &= e^{i\varphi} \sqrt{1-\rho} D_{\frac{n-m}{2}, 0}^{\frac{n+m}{2}}(\sqrt{1-\rho}). \quad (7.42) \end{aligned}$$

В нашем случае D -функция выражается через присоединенные функции Лежандра, например при $\mu > 0$:

$$D_{\mu, 0}^s(\cos \theta) = \sqrt{\frac{(s-\mu)!}{(s+\mu)!}} P_s^\mu(\cos \theta), \quad (7.43)$$

после чего приходим к формуле (3.11).

Заметим еще, что из (7.42) следует неравенство

$$|U_{mn}| \leq |U_{00}|. \quad (7.44)$$

Это неравенство оказывается полезным при рассмотрении вопроса об унитарно неэквивалентных представлениях канонических перестановочных соотношений в случае бесконечного числа степеней свободы. Приведем простой пример. Рассмотрим систему бесконечного числа гармонических осцилляторов, описываемых операторами a_i, a_i^+ , $i, j = 1, 2, \dots$, которые подчиняются каноническим соотношениям коммутации $[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$. Простейшее каноническое преобразование такой системы имеет вид

$$b_i = u_i a_i + v_i a_i^+, \quad b_i^+ = v_i a_i + u_i a_i^+ \quad (7.45)$$

(u_i и v_i можно взять действительными).

Определим обычным способом вакуумные состояния $\Phi_{(0)}$ и $\Psi_{(0)}$ системы: $a_i \Phi_{(0)} = 0$, $b_i \Psi_{(0)} = 0$. В более подробной записи $\Phi_{(0)} = |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$, $\Psi_{(0)} = |\tilde{0}, \tilde{0}, \dots, \tilde{0}, \dots\rangle$. Далее построим два гильбертовых пространства \mathcal{H} и $\tilde{\mathcal{H}}$, базисные векторы $\Phi_{(n)}$ и $\Psi_{(m)}$ которых имеют вид *)

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{(n)} = |n_1, n_2, \dots\rangle &= \frac{a_1^{+n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{a_2^{+n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots |0, 0, \dots\rangle, \\ \Psi_{(m)} = |\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots\rangle &= \frac{b_1^{+m_1}}{\sqrt{m_1!}} \frac{b_2^{+m_2}}{\sqrt{m_2!}} \dots |\tilde{0}, \tilde{0}, \dots\rangle. \end{aligned} \right\} (7.46)$$

Для квадрата модуля скалярного произведения $\Psi_{(0)}$ и $\Phi_{(0)}$ получаем выражение

$$|\langle \Psi_{(0)} | \Phi_{(0)} \rangle|^2 = \prod_{i=1}^{\infty} \sqrt{1 - \rho_i}, \quad \rho_i = \left| \frac{v_i}{u_i} \right|^2. \quad (7.47)$$

Заметим, что хотя все множители в правой части (7.47) отличны от нуля, их произведение (в силу бесконечного числа сомножителей) может равняться нулю. Это будет так, если величины ρ_i не стремятся достаточно быстро к нулю при $i \rightarrow \infty$. При этом вакуумные состояния $\Psi_{(0)}$ и $\Phi_{(0)}$ оказываются ортогональными друг другу. Нетрудно показать, что в этом случае и любые два базисных вектора $\Psi_{(m)}$ и $\Phi_{(n)}$ ортогональны друг другу. В самом деле,

$$|\langle \Psi_{(m)} | \Phi_{(n)} \rangle|^2 = \prod_{i=1}^{\infty} W_{m_i n_i}(\rho_i), \quad (7.48)$$

и в силу неравенства (7.44) получаем

$$|\langle \Psi_{(m)} | \Phi_{(n)} \rangle|^2 \leq |\langle \Psi_{(0)} | \Phi_{(0)} \rangle|^2, \quad (7.49)$$

откуда и следует ортогональность базисных, а следовательно, и любых векторов пространств \mathcal{H} и $\tilde{\mathcal{H}}$. Теперь

*) Пространства \mathcal{H} и $\tilde{\mathcal{H}}$ представляют собой бесконечные тензорные произведения гильбертовых пространств $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_m \otimes \dots$, $\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}}_1 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_2 \otimes \dots \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n \otimes \dots$. Математически строгая теория таких пространств была построена И. фон Нейманом (1938).

очевидно, что переход от пространства \mathcal{H} к пространству $\tilde{\mathcal{H}}$ не является унитарным преобразованием или, иными словами, не существует унитарного преобразования \hat{U} такого, что $b_i = \hat{U}^+ a_i \hat{U}$.

Мы привели простейший пример унитарно неэквивалентных представлений канонических перестановочных соотношений. Ряд других примеров, а также детальное рассмотрение этого вопроса можно найти в работе А. Вайтмана и С. Швебера (1955), книгах И. Сигала (1963), А. Вайтмана (1964), Ф. А. Березина (1965) и обзорной статье Ф. А. Березина (1969).

Переходя к общему случаю осциллятора с переменной частотой при наличии внешней силы, заметим, что включение силы $f(t)$ не меняет общего хода рассуждения. Укажем поэтому лишь на изменения в окончательных формулах.

Временная эволюция операторов \hat{x} и \hat{p} имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \hat{x}(t) &= C_{11} \hat{x}(0) + C_{12} \hat{p}(0) + \eta(t), \\ \hat{p}(t) &= C_{21} \hat{x}(0) + C_{22} \hat{p}(0) + \dot{\eta}(t), \end{aligned} \right\} (7.50)$$

где $\eta(t)$ — решение, описывающее вынужденные колебания классического осциллятора,

$$\ddot{\eta} + \omega^2 \eta = f, \quad \eta(0) = \dot{\eta}(0) = 0. \quad (7.51)$$

Пусть a^+ и a — операторы рождения и уничтожения для начального состояния (при $\omega = \omega_-$), b^+ и b — для конечного (при $\omega = \omega_+$). Связь между ними такова:

$$\begin{aligned} \hat{b}(t) &= \hat{V}^+(t) \hat{a}(0) \hat{V}(t) = \\ &= u(t) (a(0) + d(t)) + v(t) (a^+(0) + d^*(t)), \end{aligned} \quad (7.52)$$

где

$$d(t) = \frac{i}{\sqrt{2\omega_-}} \int_0^t f(t') \xi(t') dt', \quad d(\infty) = d,$$

а функции $u(t)$ и $v(t)$ выражаются через $\xi(t)$ (см. формулу (7.31)). Таким образом, результирующее преобразование \hat{V} состоит теперь из трех частей:

$$\hat{V}(t) = \hat{U}(t) \hat{D}(t) = \hat{T}^+ \hat{S}(t) \hat{D}(t), \quad (7.53)$$

где \hat{O} , \hat{T} и \hat{S} определены выше и не зависят от силы f , а $\hat{D}(t)$ есть просто оператор сдвига:

$$\hat{D}^+(t) a \hat{D}(t) = a + d(t). \quad (7.54)$$

В качестве примера применения формулы (7.53) рассмотрим случай, когда в начальный момент $t = 0$ осциллятор находится в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$. Поскольку $D(t)|\alpha\rangle \sim |\alpha + d(t)\rangle$, то эволюция состояния $|\alpha\rangle$ под действием $f(t)$ и $\omega(t)$ дает то же самое конечное состояние, что и эволюция когерентного состояния $|\alpha + d(t)\rangle$ под действием одной лишь переменной частоты $\omega(t)$. В частности, для населенностей W_m при $t \rightarrow +\infty$ справедлива формула (3.21) с заменой $\alpha \rightarrow \alpha + d$.

Гейзенберговское представление для операторов $\hat{x}(t)$ и $\hat{p}(t)$ тесно связано с фазовой плоскостью (X, P) для классического осциллятора. Введем безразмерные переменные:

$$X = \sqrt{\frac{\omega(t)}{2}} x, \quad P = \frac{1}{\sqrt{2\omega(t)}} p, \quad \alpha = X + iP. \quad (7.55)$$

Их предельные значения при $t \rightarrow \pm\infty$ обозначим через X_{\pm} и P_{\pm} ; при этом

$$X_+ = \sqrt{\frac{\omega_+}{\omega_-}} X_-, \quad P_+ = \sqrt{\frac{\omega_-}{\omega_+}} P_-. \quad (7.56)$$

Покажем, как найти вид распределения W_{mn} в квазиклассическом случае, когда $m, n \gg 1$ и $W_{mn} \approx 2\bar{W}_{mn} \cos^2 \Phi_{mn}$. (Здесь Φ_{mn} — быстро осциллирующая фаза, а \bar{W}_{mn} — усредненная по этим осцилляциям вероятность, являющаяся плавной функцией m .) Начальному состоянию $|n, \omega_-\rangle$ отвечает состояние классического осциллятора со случайной фазой ϕ , равномерно распределенной от 0 до 2π . На фазовой плоскости (X_-, P_-) оно изображается окружностью

$$X_-^2 + P_-^2 = \frac{E_-}{\omega_-} = n. \quad (7.57)$$

Аналогично для конечного состояния $|m, \omega_+\rangle$ на плоскости (X_+, P_+) имеем $X_+^2 + P_+^2 = m$. Квазиклассическое

распределение \bar{W}_{mn} при этом определяется интегралом

$$\bar{W}_{mn} = \frac{1}{\pi} \int dX_+ dP_+ \delta(X_+^2 + P_+^2 - m) \delta(X_-^2 + P_-^2 - n), \quad (7.58)$$

для вычисления которого нужно знать связь начальных и конечных переменных. Изменение x и p , согласно уравнениям (7.50), приводит к тому, что окружность (7.57) превращается в эллипс с помощью смещения, растяжения и поворота осей (площадь при этом сохраняется, так как $\det C_{ij}(t) = 1$). Обозначая через $\lambda^{1/2}$ коэффициент растяжения, через $d'(t)$ — смещение центра эллипса и через ϕ — угол поворота большой оси эллипса относительно направления $d'(t)$ (рис. 22), находим при $t \rightarrow \infty$

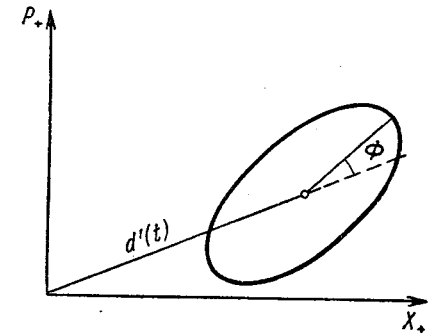


Рис. 22.

$$\lambda = \frac{1 + \sqrt{\rho}}{1 - \sqrt{\rho}}, \quad \phi = \pm \frac{\pi}{2} + \arg(e^{-i\phi} - \sqrt{\rho} e^{i\phi}),$$

$$d'(t) = \frac{\omega\eta + i\dot{\eta}}{\sqrt{2\omega}} = \sqrt{\frac{\omega_+}{\omega_-}} (C_1^* d - C_2 d^*) e^{-i\omega_+ t}. \quad (7.59)$$

Входящие сюда величины d и ϕ определены формулами (1.19) и (4.6).

Из (7.59) видно, что при $t \rightarrow \infty$ эллипс вращается на фазовой плоскости с угловой скоростью ω_+ , сохраняя свою форму и размеры*). В интеграл (7.58) дают вклад лишь точки пересечения этого эллипса с окружностью радиуса \sqrt{m} , число которых может равняться 0, 2 или 4

*) Это вращение соответствует зависимости операторов $a(t) = a \exp(-i\omega_+ t)$ от времени и не сказывается на вероятностях перехода W_{mn} .

(в зависимости от величины m). В качестве конкретного примера рассмотрим случай $\phi = 0$ (эллипс смещается

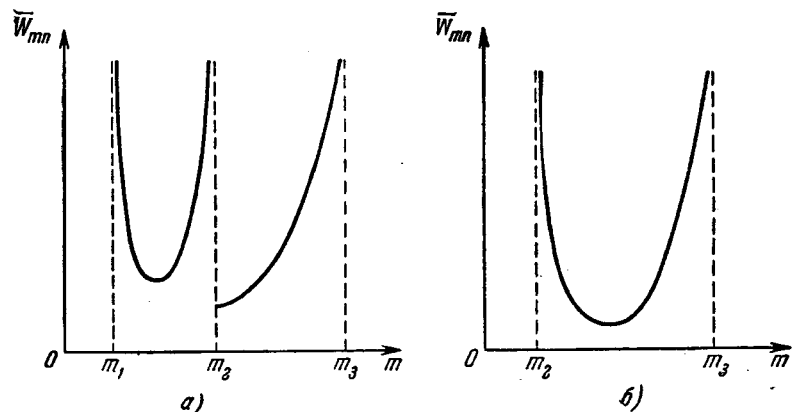


Рис. 23.

вдоль своей главной оси). Вид распределения \bar{W}_{mn} зависит тогда от величины v . Пусть

$$v_0 = 16nr \frac{1}{(1 + \sqrt{\rho})^4}.$$

При $v < v_0$ имеются четыре точки пересечения и

$$\begin{aligned} \bar{W}_{mn} = & \frac{1}{2\pi\sqrt{m-m_1}} \{[(\sqrt{m_2-m_1} + \sqrt{m-m_1}) \times \\ & \times (\sqrt{m_3-m_1} - \sqrt{m-m_1})]^{-1/2} + \theta(m_2-m) \times \\ & \times [(\sqrt{m_2-m_1} - \sqrt{m-m_1})(\sqrt{m_3-m_1} + \sqrt{m-m_1})]^{-1/2}\}. \end{aligned} \quad (7.60)$$

Здесь m изменяется от m_1 до m_3

$$m_1 = n \frac{1 - \sqrt{\rho}}{1 + \sqrt{\rho}} - v \frac{1 - \rho}{4\sqrt{\rho}}, \quad m_{2,3} = \frac{1 + \sqrt{\rho}}{1 - \sqrt{\rho}} (\sqrt{n} \mp \sqrt{v})^2 \quad (7.61)$$

(причем $m_1 \leq m_2 < m_3$). Качественно вид \bar{W}_{mn} показан на рис. 23, а. Корневые особенности при $m = m_1, m_2$ и m_3 соответствуют точкам касания окружности $X_+^2 + P_+^2 = m$ с эллипсом. Область $m_1 < m < m_3$ является клас-

сически разрешенной; вне ее вероятности \bar{W}_{mn} экспоненциально падают.

В случае $v > v_0$ имеются лишь две точки пересечения, и формула для \bar{W}_{mn} упрощается (рис. 23, б)

$$\begin{aligned} \bar{W}_{mn} = & \frac{1}{2\pi\sqrt{m-m_1}} [(\sqrt{m-m_1} - \sqrt{m_2-m_1}) \times \\ & \times (\sqrt{m_3-m_1} - \sqrt{m-m_1})]^{-1/2} \quad (7.62) \\ & (m_2 < m < m_3). \end{aligned}$$

При $v = v_0$ m_1 совпадает с m_2 и распределения, показанные на рис. 23, а и б, переходят одно в другое. Множитель $\cos^2 \phi_{mn}$ приводит к быстрым осцилляциям вероятностей перехода вокруг среднего значения \bar{W}_{mn} аналогично тому, как это видно на рис. 19.

ГЛАВА VII

КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

§ 1. Введение. Теория Гамова

В этой главе мы встречаемся с новым типом явлений: распадом радиоактивных ядер или нестабильных частиц и резонансным рассеянием частиц. Имеется широкий круг явлений, связанных с нестабильными состояниями. При этом в настоящее время наибольшее внимание уделяется рассмотрению резонансных состояний сильно взаимодействующих частиц, или просто резонансов, большое количество которых было открыто в последние годы.

Строго говоря, с полностью стабильными состояниями мы встречаемся крайне редко. Так, например, из всех известных нам «элементарных» частиц стабильны лишь протон, электрон, γ -квант и нейтрино. Большая часть состояний ядер также нестабильна.

Особый тип нестабильных состояний представляют возбужденные состояния атомов и ядер. В нерелятивистской квантовой механике эти состояния, как правило, считают обычными связанными состояниями. При этом пренебрегают взаимодействием электронов с полем излучения, которое приводит к переходам из верхних состояний в нижние с излучением γ -квантов. При более точной постановке вопроса такое взаимодействие должно быть учтено. Существенно здесь то, что одно и то же взаимодействие (электромагнитное) приводит как к связи электрона, так и к переходу его из одного состояния в другое. Поэтому нельзя, строго говоря, выключить взаимодействие, ответственное за переходы, оставив взаимодействие, приводящее к связанным состояниям. Это приводит к тому, что стабильным оста-

ся лишь основное состояние атома (ядра), к которому непосредственно примыкает непрерывный спектр (дискретный спектр исчезает). При этом состояниями непрерывного спектра являются состояния рассеяния γ -кванта на атоме, находящемся в основном состоянии. Этих вопросов далее мы, однако, касаться не будем.

Явления, связанные с нестабильностью, можно описать с помощью уже известной нам полной системы стационарных состояний. Однако при этом описании мы встречаемся с рядом качественных особенностей. Например, при рассеянии частицы на потенциале, который имеет вид ямы, отделенной от внешней области потенциальным барьером, волновая функция частицы во внутренней области (например, $\psi_E(0)$) при определенных значениях энергии $E = E_n$ резко возрастает. При этом обычно оказывается, что волновая функция $\psi_E(r)$, продолженная в комплексную плоскость E , имеет полюс вблизи E_n при $E = E_{0n}$. В этом случае решение у. Ш. при $E = E_{0n}$ приводит к так называемым квазистационарным состояниям, или состояниям с комплексной энергией.

Любопытно, что для квазистационарных состояний можно ввести понятие нормы и развить теорию возмущений, аналогичную обычной теории возмущений для стационарных состояний. Заметим, однако, что в настоящее время теорию квазистационарных состояний нельзя считать полностью завершенной, и потому при рассмотрении квазистационарных состояний требуется известная осторожность.

К счастью, многие интересные вопросы теории квазистационарных состояний можно выяснить на примере точно разрешимых моделей. К таким вопросам относятся, например, вопросы об аналитических свойствах волновой функции квазистационарного состояния, об определении среднего времени жизни нестабильной частицы по рассеянию продуктов ее распада друг на друга, об экспоненциальном характере распада нестабильной частицы, о рождении нестабильной частицы, об асимптотике волновой функции распадающейся частицы при $r \rightarrow \infty$ и $t \rightarrow \infty$.

Глава заканчивается кратким рассмотрением других типов долгоживущих состояний (например, состояний,

соответствующих виртуальному уровню. Заметим, что ряд вопросов теории нестабильных частиц с учетом превращения их друг в друга (например, вопрос об электрическом дипольном моменте нестабильной частицы) разобран в гл. XI.

Первым и самым важным применением теории квазистационарных состояний была теория α -распада тяжелых ядер, созданная Г. А. Гамовым (1928) и независимо, но несколько позднее Р. Генри и Е. Кондоном (1929).

Эта теория сохранила свое значение для вычисления вероятности распада радиоактивных ядер до настоящего времени; выяснение возможности распада с испусканием одного протона или двух протонов (В. И. Гольданский, 1960, 1965) тоже производится на основе этой теории. Но в историческом плане значение теории особенно велико потому, что теория Гамова была первым успешным применением квантовой механики к атомному ядру.

Напомним хорошо известные исходные факты: при α -распаде данного ядра энергия α -частиц имеет вполне определенное значение; так, например, при распаде $U_{92}^{238} \rightarrow Th_{90}^{234} + \alpha$ (изотоп Th_{90}^{234} носит исторически сложившееся название UX_1) энергия α -частицы равна 4,7 Мэв. Между α -частицей и дочерним ядром Th_{90}^{234} , несомненно, действует электростатическое отталкивание: потенциал взаимодействия определяется формулой

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} = \frac{90^2 e^2}{r} = \frac{260}{r} \frac{\text{Мэв}}{\text{ферми}},$$

значит, потенциал равен 4,7 Мэв на расстоянии 55 ферми. Ядерные силы действуют лишь на расстоянии порядка размера ядра, т. е. порядка

$$1,2 A^{1/3} \text{ ферми} = 1,2 (234)^{1/3} \text{ ферми} = 7,4 \text{ ферми},$$

где электрический потенциал равен приблизительно 35 Мэв.

То, что известно о потенциале, показано на рис. 24. По оси ординат отложена энергия системы $Th_{90}^{234} + \alpha$,

по оси абсцисс — расстояние между α -частицей и ядром. Правее R потенциал чисто электростатический, левее R добавляется (отрицательное) ядерное взаимодействие. Состояние материнского ядра U_{92}^{238} соответствует энергии E_1 , показанной пунктиром, $E_1 = 4,7$ Мэв. Очевидно, суммарный потенциал, показанный слева от R , должен быть ниже E_1 . Между R и R_1 находится область, где $U > E_1$, т. е. область, в которой по классической механике частица не могла бы находиться.

Если бы правее R потенциал не спадал, а оставался постоянным (как это показано штрих-пунктиром на рис. 24), то уровень энергии E_1 был бы обычным стационарным состоянием.

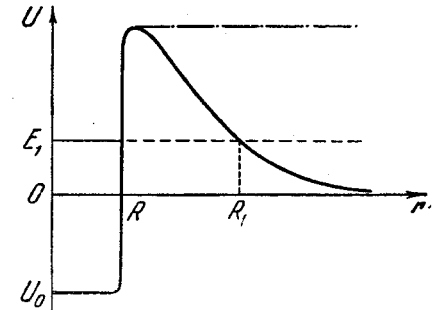


Рис. 24.

В этом приближении исчезло самое интересное — распад; но так как распад есть явление редкое (период распада $4,5 \cdot 10^9$ лет!), отличие E'_1 от E_1 ничтожно.

Для того чтобы определить вероятность распада в первом приближении, построим волновую функцию на участке от R до R_1 в квазиклассическом приближении. В этом приближении

$$r\psi = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int p dr\right], \quad p = \pm \sqrt{2m(E_1 - U)}$$

(p есть классический импульс, соответствующий полной энергии $E = \frac{p^2}{2m} + U$). Под барьером величина p мнимая, и соответственно в показателе ψ стоит действительная величина. Таким образом, под барьером имеются два независимых решения, одно возрастающее, другое — убывающее. Вероятность прохождения через барьер W пропорциональна отношению $|\psi(R_1)|^2/|\psi(R)|^2$, и очевидно, что это отношение нужно брать по убывающему

решению, для которого отношение минимально и равно *)

$$W = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{R_1} \sqrt{2m(U-E_1)} dr}, \quad (1.1)$$

$$W = e^{-\frac{\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E_1}} \left(1 - \frac{1}{\pi} (2\varphi_1 + \sin 2\varphi_1)\right)}, \quad (1.1')$$

$$\varphi_1 = \arcsin \sqrt{\frac{R}{R_1}}.$$

Величина R_1 определяется той точкой, где $U - E_1 = 0$. Заметим, что если продлить кулоновскую зависимость $U(r)$ до $R = 0$ и соответственно заменить R нулем в нижнем пределе интеграла, то интеграл все равно сходится и получается простой результат

$$W = e^{-\frac{\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E_1}}} = e^{-\frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_1}}; \quad (1.2)$$

W — проникаемость барьера — есть безразмерная величина. Чтобы найти вероятность распада w (величину, обратную времени распада), вероятность прохождения через барьер следует умножить на число ударов α -частицы в единицу времени n о левый край барьера:

$$w = nW.$$

Здесь

$$n \sim \frac{R}{v} \sim \frac{R}{\sqrt{\frac{2(E_1 - U_0)}{m}}}.$$

Это простейшее выражение **) разумно объясняет основное свойство α -распада: ничтожно малую вероят-

*) Вывод формулы (1.1) с помощью соотношения неопределенностей можно найти в заметке Б. Козна (1965). Задача о прохождении волнового пакета через потенциальный барьер рассматривалась в работах Л. Мак-Колла (1932), Т. Хартмана (1962).

**) Читателя, интересующегося более точными формулами и деталями их вывода, отсылаем к статье Т. Сексла (1933).

Отметим здесь же следующий парадокс. Найденная нами волновая функция α -частицы является сферически-симметричной, и потому непонятно, как может возникнуть наблюдаемый на опыте трек α -частицы. Этот парадокс был полностью разрешен Н. Моттом (1929), к статье которого мы и отсылаем интересующихся читателей.

ность распада при большом барьере (для урана $W \sim 10^{-37}$) и весьма сильную зависимость вероятности распада от E_1 — энергии α -частицы.

Вместе с тем ясно, что даже в том случае, когда выполнены все физические предпосылки теории, когда можно говорить об индивидуальной α -частице внутри ядра, — предэкспоненциальный множитель определяется лишь приближенно. Точное нахождение его является сложной задачей, требующей знания поведения ψ -функции вблизи левой точки поворота, и потому этот множитель существенным образом зависит от вида потенциала внутри ямы.

Согласно общей теории в ситуации, изображенной на рис. 24, есть непрерывный спектр вещественных значений энергии и только. В принципе, кроме непрерывного спектра с $E > 0$, возможны еще дискретные уровни с $E < 0$, но очевидно, что если $U_0 > 0$, то их нет.

Какой же смысл имеет энергия E_1 , как отобразить в непрерывном спектре одно определенное значение энергии? Решение задачи подсказывает сама физическая картина явления. Волновая функция частицы в ядре ($0 < r < R$) с течением времени убывает. Справа от R_1 за барьером, существует поток частиц, летящих по радиусу в сторону $r \rightarrow \infty$.

Напомним, что стационарные состояния непрерывного спектра с вещественной энергией описывают рассеяние частиц; волновая функция на большом расстоянии

от центра есть суперпозиция волновых функций $\frac{e^{-ip_0 r/\hbar}}{r}$ и $\frac{e^{ip_0 r/\hbar}}{r}$, т. е. суперпозиция волны, падающей на центр,

и волны расходящейся, удаляющейся от центра; амплитуды этих волн тождественно равны между собой по модулю: поток падающих частиц и поток отраженных частиц равны, частицы не возникают и не исчезают.

При описании α -распада мы требуем, чтобы вдали от центра была только расходящаяся волна. Это не противоречит сохранению числа частиц именно потому, что с течением времени уменьшается $\int |\psi|^2 dr$ внутри ядра.

Макроскопическое уравнение распада:

$$\frac{dN}{dt} = -\omega N; \quad N = N_0 e^{-\omega t},$$

где N — число радиоактивных ядер, т. е. число частиц внутри сферы $r = R$. В данном ансамбле число частиц $N \sim \int |\psi|^2 dr$. Значит, нужно искать решение вида

$$\psi = \psi(r) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar} - \frac{\omega t}{2}} = \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_1 - i \frac{\Gamma}{2}) t} = \psi(r) e^{-\frac{i\tilde{E}t}{\hbar}},$$

где $\tilde{E} = E_1 - i\Gamma/2$ есть комплексная величина, а мнимая часть ее $\Gamma/2$ связана с вероятностью распада: $\Gamma = \hbar\omega$ *). Таким образом, в нестационарной задаче можно применить метод разделения переменных; $\psi(r, t)$ ищем в виде произведения $\psi(r)$ на экспоненту от t так же, как это делалось для стационарных задач.

Сходство распространяется и дальше: в стационарных задачах дискретные уровни возникали при $E < 0$, когда при больших r линейно независимые решения имели вид $e^{+|k|r}$ и $e^{-|k|r}$; требованию, чтобы при $r \rightarrow \infty$ искомого решение имело вид $e^{-|k|r}$, можно было удовлетворить лишь при определенных дискретных E .

Точно так же в нестационарной задаче при больших r имеются два линейно независимых решения e^{ikr}/r и e^{-ikr}/r , и требование, чтобы искомого решение имело вид e^{ikr}/r , при $r \rightarrow \infty$ отбирает дискретное комплексное значение $\tilde{E} = E_1 - i\Gamma/2$. Таким образом, у. III.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right] \psi$$

при подстановке $\psi = \frac{1}{r} \psi(r) e^{-\frac{i\tilde{E}t}{\hbar}}$ из уравнения в частных производных превращается в обыкновенное:

$$\left[\tilde{E} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - U(r) \right] \psi(r) = 0, \quad (1.3)$$

*) Метод комплексных собственных значений восходит еще к Дж. Дж. Томсону (1884), рассмотревшему этим методом задачу об электромагнитных колебаниях заряда на идеально проводящей сфере.

и граничное условие

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{d \ln \psi}{dr} = \frac{i \sqrt{2m\tilde{E}}}{\hbar} \quad (1.4)$$

отбирает дискретные комплексные значения \tilde{E} .

Так решается физическая задача об определении энергии частиц в «радиоактивном» подбарьерном состоянии $E_1 = \text{Re}(\tilde{E})$ и об определении времени жизни этого состояния $\Gamma = -2 \text{Im} \tilde{E}$ (связь Γ и вероятности распада ω см. выше).

Эта процедура вызывает ряд сомнений в математической строгости и обоснованности; впрочем, любопытно, что никто не сомневается в правильности самого результата, т. е. в правильности найденных численных значений E_1 и ω ; нарекания вызывает «только» способ их получения. Критика связана с видом $\psi(r)$. Так как \tilde{E} комплексно, то соответственно комплексно и значение k . В асимптотике $\psi(r) \sim e^{ikr}$. При этом легко убедиться, что отрицательному знаку мнимой части \tilde{E} соответствует

$$\left. \begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2mE_1}}{\hbar} - i \frac{\Gamma}{4\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E_1}}, \\ \psi(r) &\sim e^{\frac{i\sqrt{2mE_1}}{\hbar} r} e^{\frac{\Gamma}{4\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E_1}} t} \end{aligned} \right\} \quad (1.5)$$

(мы разложили $\sqrt{\tilde{E}}$, считая $\Gamma \ll E_1$).

Таким образом, функция $\psi(r)$ при $r \rightarrow \infty$ экспоненциально (хотя и медленно, так как Γ мало) возрастает *). Очевидно, что такая функция не может быть нормирована, ведь $\int |\psi|^2 dr$ расходится! В следующих параграфах будет показано, как решение собственно нестационарного уравнения $\psi(r, t)$ в частных производных приближается к решению с разделенными переменными $\psi(r) e^{-i\tilde{E}t/\hbar}$. Нормированная функция $\psi(r, t)$ в ограниченной области пространства всегда приближается к ненормированной $\psi(r) e^{-i\tilde{E}t/\hbar}$.

*) Именно на этом основании метод Томсона подвергся критике со стороны Г. Лэмба (1900).

Дальше, в § 6 будет показано, что и для ненормированной $\psi(r)$ есть выражение, играющее роль нормы в теории возмущений и в задаче об определении амплитуды $\psi(r)$ при произвольном начальном состоянии.

Здесь же мы ограничимся физическим объяснением возрастания $\psi(r)$ при $r \rightarrow \infty$. Ясно, что на данном расстоянии находятся в данный момент t_0 частицы, которые были испущены, т. е. вышли из-под барьера в момент $t = t_0 - r/v$, где v — скорость частиц. Но в более ранний момент времени в силу экспоненциальной зависимости от времени была больше амплитуда ψ в центре.

В самом деле, множитель $\exp\left(\frac{\Gamma}{4\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E_1}} t\right)$ можно переписать, учитывая связь Γ и ω , как $\exp\left(\frac{\omega}{2} \frac{r}{v}\right) = \exp\left(\frac{\omega}{2}(t_0 - t)\right)$. Отсюда и следует, что $\psi(r, t_0) = \psi(0, t_0 - r/v)$ *).

В заключение отметим, что все теоремы о разложении произвольной функции по собственным функциям задачи, образующим полную систему, относятся к совокупности $\psi_E(r)$ для вещественных E . Таким образом, найденная $\psi_{\tilde{E}}(r)$ не входит в полную систему собственных функций, что и естественно в связи с поведением $\psi_{\tilde{E}}(r)$ при $r \rightarrow \infty$.

Собственные функции сплошного спектра с вещественным E при \tilde{E} , близком к $E_1 = \text{Re } \tilde{E}$, имеют особый вид; мы увидим, что комплексное значение \tilde{E} имеет смысл полюса в комплексной плоскости энергии. С другой стороны, по этой причине определение амплитуды $\psi_{\tilde{E}}(r)$ в реальной задаче с произвольной $\psi(r, t=0)$ требует особой техники, отличающейся от обычного разложения по полной ортонормированной системе.

После этого вступления разберем более подробно весь круг вопросов, связанных с существованием сравнительно долгоживущих квазистационарных состояний.

*) Аналогичные аргументы использовал в связи с методом Томсона еще А. Ляв (1904).

§ 2. Волновые функции

Выше уже говорилось, что квазистационарным состояниям соответствуют полюса величины $S(k) = e^{2i\delta(k)}$, расположенные в нижней полуплоскости k . Это свойство фазы рассеяния позволяет получить ряд общих результатов относительно вида и энергетической зависимости волновой функции при энергиях E вблизи полюса, найти вид сечения рассеяния и т. д. *).

Рассмотрим полюс $S(k) = e^{2i\delta(k)}$, расположенный в комплексной плоскости в точке

$$k_0 = k_1 - ik_2.$$

В этой точке волновая функция $\chi_k(r)$, определяемая ее асимптотическим разложением (для простоты считаем, что $l = 0$ и что частицы не заряжены)

$$\chi_k(r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta(k)), \quad (2.1)$$

обращается в бесконечность тождественно при всех значениях r .

Найдем вид $S(k)$ вблизи полюса. Напомним, что $S(k)$ должна удовлетворять условиям симметрии (1.5) — (1.6) гл. III: должна иметь полюса в точках k_0 и $-k_0$ и нули в точках k_0^* и $-k_0^*$; на действительной оси $S(k)$ по модулю равна единице. Наиболее общее выражение, удовлетворяющее этим условиям, есть

$$S(k) = e^{2i\varphi(k)} \frac{(k - k_0^*)(k + k_0)}{(k - k_0)(k + k_0^*)}, \quad (2.2)$$

где $\varphi(k)$ — произвольная функция k , действительная при действительных k и удовлетворяющая свойствам симметрии (1.5), (1.6) гл. III. Как правило, $\varphi(k)$ является достаточно плавной функцией, так что вблизи полюса ее можно считать постоянной (ее иногда называют потенциальной фазой).

*) Для более детального изучения аналитических свойств волновых функций читатель отсылается к работе Р. Пайерлса (1959) и книге Р. Ньютона (1966).

В задачах о рассеянии энергия и волновой вектор частиц всегда действительны. Выражение для фазы рассеяния получается из общей формулы (2.2), в которой k теперь надо считать действительной положительной величиной. Для фазы рассеяния при $k_2 \ll k_1$, $k \sim k_1$ получаем

$$\delta = \varphi - \operatorname{arctg} \frac{k_2}{k - k_1}. \quad (2.2')$$

Обычно вместо волновых векторов пользуются энергиями

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k_1 - ik_2)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} [(k_1^2 - k_2^2) - 2ik_1k_2] \equiv E_0 - \frac{i\Gamma}{2}. \quad (2.3)$$

Здесь E_0 называется резонансной энергией, а Γ — шириной уровня (резонанса). Так как в плоскости k полюса располагаются на нижней полуплоскости, то на плоскости энергии эти полюса находятся на втором (так называемом нефизическом) листе римановой поверхности; при $\Gamma \ll E_0$ и $E \sim E_0$ легко получить формулы, эквивалентные (2.2) и (2.2'):

$$S(E) = e^{2i\varphi} \frac{E - E_0 - \frac{i\Gamma}{2}}{E - E_0 + \frac{i\Gamma}{2}}, \quad \delta = \varphi - \operatorname{arctg} \frac{\Gamma/2}{E - E_0}. \quad (2.4)$$

Пользуясь этими формулами, находим выражение для сечения рассеяния

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} |S - 1|^2 = \frac{\pi}{k^2} \left\{ \frac{\Gamma^2}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} - 4 \operatorname{Re} \left[e^{i\varphi} \sin \varphi \frac{\Gamma}{E - E_0 + \frac{i\Gamma}{2}} \right] + 4 \sin^2 \varphi \right\}.$$

Первый член здесь описывает резонансное рассеяние на квазистационарном состоянии (Γ . Брейт, Е. Вигнер, 1936), последний член соответствует так называемому потенциальному рассеянию, а второй — их интерференции.

Пусть потенциал $V(r)$ обладает конечным радиусом R . Обозначим через $\chi_k^{(0)}$ регулярное в нуле решение

у. Ш. внутри области действия потенциала. Будем нормировать это решение условием

$$\int_0^R |\chi_k^{(0)}(r)|^2 dr = 1. \quad (2.5)$$

Полная волновая функция тогда равна

$$\chi_k(r) = \begin{cases} A(k) \chi_k^{(0)}(r) & \text{при } r \leq R, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta_0) & \text{при } r > R. \end{cases} \quad (2.6)$$

В точке $k = k_0$ эта функция должна тождественно обращаться в бесконечность. В области $r > R$ это обеспечивается обращением в бесконечность величины $S(k)$ и соответственно фазы рассеяния $\delta(k)$. Во внутренней области $\chi_k^{(0)}$ конечна по условию и волновая функция может обращаться в бесконечность тождественно, лишь если в бесконечность обращается коэффициент A в (2.6).

Легко вычислить величину коэффициента A . Для этого используем полученную нами формулу (3.18) гл. III. Подставляя в нее выражение для фазы рассеяния (2.2) или (2.4) и оставляя лишь доминирующий член, найдем

$$\int_0^R \chi_k^2 dr = \frac{\hbar}{\pi} \sqrt{\frac{2E_0}{m}} \frac{\Gamma/2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4} \equiv A^2(k). \quad (2.7)$$

Среднее значение волновой функции, очевидно, равно

$$\bar{\chi}_k \approx \frac{1}{R^{1/2}} A(k); \quad (\bar{\chi}_k^2)_{\max} = \frac{1}{R} \frac{2\hbar v_0}{\pi\Gamma}; \quad v_0 = \sqrt{\frac{2E_0}{m}}. \quad (2.7')$$

Снаружи барьера $\chi^2 \sim 1$, что намного меньше, чем максимальная плотность частиц внутри барьера, если Γ достаточно мало. Физически это означает, что в области $r < R$ происходит накопление частиц: частицы, попавшие в эту область, живут некоторое время, прежде чем им представится возможность вылететь наружу. Время жизни частиц внутри барьера во столько же раз больше времени пролета этой области $\tau = R/v_0$, во сколько раз

плотность частиц во внутренней области больше, чем плотность снаружи. Отсюда получаем, что среднее время жизни τ_0 квазистационарного состояния при $E \sim E_0$ по порядку величины равно (ниже будут приведены более точные формулы)

$$\tau_0 \sim \tau \frac{(\chi^2)_{\max}}{1} \sim \frac{R}{v_0} \frac{1}{R} \frac{\hbar v_0}{\Gamma} \sim \frac{\hbar}{\Gamma}. \quad (2.8)$$

Это время может быть очень большим. Именно поэтому возникло название «квазистационарное» состояние. Подчеркнем еще раз, что формулы (2.7), (2.8) относятся к задачам о рассеянии частиц; энергия E и волновой вектор k поэтому действительны.

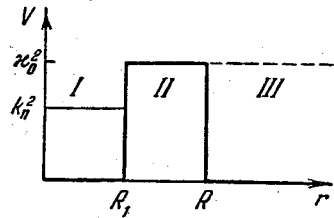


Рис. 25.

Качественное рассмотрение различных частных случаев показывает, что сильная зависимость волновой функции от энергии вблизи некоторых (положительных) точек может осуществляться, лишь если потенциал имеет вид ямы, окруженной одним или несколькими барьерами (рис. 25).

Действительно, пусть мы имеем яму с одним барьером. Волновая функция в этом случае имеет вид

$$\chi_k(r) = \begin{cases} A(k) \chi_k^{(0)}(r) & \text{при } r < R_1, \\ \alpha(k) \chi^{(+)}(r) + \beta(k) \chi^{(-)}(r) & \text{при } R_1 < r < R, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta) & \text{при } r > R. \end{cases} \quad (2.9)$$

Здесь $\chi_k^{(0)}$ — регулярное в нуле решение у. Ш. в области I, а величины $A(k)$, $\alpha(k)$ и $\beta(k)$ полностью определяются из условий сшивания решений на границах областей. Для определенности будем нормировать $\chi_k^{(0)}$ условием (2.5). Функции $\chi^{(-)}$ и $\chi^{(+)}$ — это два независимых решения у. Ш. в подбарьерной области II. Оба эти решения монотонны, причем одно спадает, а другое возрастает с ростом r . Качественно их поведение дается

формулами квазиклассического приближения

$$\chi^{(\pm)}(r) = \exp \left\{ \pm \int_{R_1}^r |k| dr \right\}; \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U)}. \quad (2.10)$$

Если потенциальный барьер достаточно широк и высок, т. е. если $\int_{R_1}^R |k| dr \gg 1$, то хотя эти функции и равны друг другу при $r = R_1$ ($\chi^{(\pm)}(R_1) = 1$), однако при $r \sim R$ они сильно различаются (рис. 26):

$$\chi^{(+)}(R) \gg \chi^{(-)}(R). \quad (2.11)$$

Сами функции $\chi_k^{(0)}$ и $\chi_k^{(\pm)}$ довольно слабо зависят от k , так как k входит в них только через посредство члена $(E - U)$ в у. Ш., который очень слабо меняется при малых изменениях E . При сшивании этих функций, однако, может возникнуть сильная энергетическая зависимость. Действительно, пусть α и β , определяемые условиями сшивания, не слишком сильно отличаются друг от друга (критерии мы получим ниже). В этом случае благодаря (2.11) внутренняя волновая функция при $r = R$ приближенно равна $\alpha \chi^{(+)}(R)$ и ее логарифмическая производная лишь слабо зависит от энергии (так как сама $\chi^{(+)}$ слабо зависит от k). Соответственно фаза $\delta(k)$ при этом также является слабой функцией энергии, а сама волновая функция $\chi_k(r)$ имеет вид, схематически изображенный на рис. 27. Существенно, что такой вид сохраняется в широком интервале значений α и β . Критерий такой ситуации, очевидно, есть

$$\left| \frac{\alpha}{\beta} \right| > \frac{\chi^{(-)}(R)}{\chi^{(+)}(R)} = \exp \left\{ -2 \int_{R_1}^R |k| dr \right\}. \quad (2.12)$$

Положение меняется кардинальным образом вблизи точек, где $\alpha(k)$ обращается в нуль. Именно в этих точках под барьером волновая функция монотонно спадает:

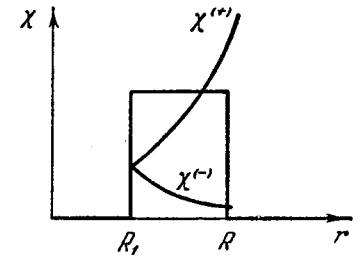


Рис. 26.

$\chi_k(r) = \beta \chi_k^{(-)}(r)$ и $\chi_k(r)$ имеет вид, схематически изображенный на рис. 28. Таким образом, вблизи точек $k=k_i$, где α обращается в нуль, волновая функция резко изменяется, проходя все стадии между случаями, изображенными на рис. 27, 28. При этом видно, что зависимость от энергии тем резче, чем меньше отношение $\chi^{(-)}(R)/\chi^{(+)}(R)$, т. е. чем шире и выше потенциальный

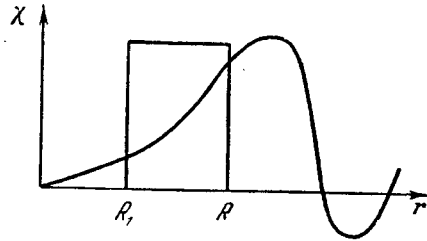


Рис. 27.

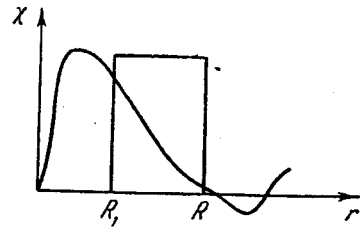


Рис. 28.

барьер. Если барьера нет, то описанная выше ситуация не может осуществиться, так как $\chi^{(+)}(R)$ и $\chi^{(-)}(R)$ будут всегда одного порядка величины.

§ 3. Пример квазистационарного состояния

Сейчас мы исследуем один конкретный пример потенциала (см. рис. 25), в котором существует квазистационарное состояние частицы.

При $r < R_1$ или $r > R$ у. Ш.

$$\chi_k'' + k^2 \chi_k = 0$$

имеет два независимых решения: $e^{\pm ikr}$. В области $R_1 < r < R$

$$\chi_k'' - \kappa^2 \chi_k = 0, \quad \text{где } \kappa = \sqrt{\chi_0^2 - k^2}, \quad \chi_0 = \sqrt{2mV_0}.$$

Найдем сначала решение, имеющее на бесконечности вид e^{ikr} . Будем искать его в виде

$$\chi_k^{(+)}(r) = \begin{cases} e^{ikr} & \text{при } r > R, \\ \alpha e^{\kappa r} + \beta e^{-\kappa r} & \text{при } R > r > R_1, \\ \alpha e^{ikr} + \beta e^{-ikr} & \text{при } r < R_1. \end{cases} \quad (3.1)$$

Условия сшивания этих выражений на границах областей дают нам значения коэффициентов:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k}{\kappa} \right) e^{ikR - \kappa R}, \\ \beta &= \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k}{\kappa} \right) e^{ikR + \kappa R}, \\ a &= \frac{\kappa}{4ik} e^{ik(R-R_1) + \kappa \rho} \left\{ \left(1 + i \frac{k}{\kappa} \right)^2 e^{-2\kappa \rho} - \left(1 - i \frac{k}{\kappa} \right)^2 \right\}, \\ b &= \frac{\kappa}{4ik} e^{ik(R+R_1) + \kappa \rho} \left\{ (1 - e^{-2\kappa \rho}) \left(1 + \frac{k^2}{\kappa^2} \right) \right\}, \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

где $\rho \equiv R - R_1$. Взяв комплексное сопряжение от $\chi_k^{(+)}(r)$, мы найдем второе независимое решение:

$$\chi_k^{(-)}(r) = \chi_k^{(+)*}(r) \sim e^{-ikr} \quad \text{при } r > R. \quad (3.3)$$

Общее решение записываем как

$$\chi_k(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} S^{-1/2} \frac{1}{2i} (-\chi_k^{(-)} + S \chi_k^{(+)}) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta). \quad (3.4)$$

Во внутренней области, согласно (3.1), эта функция имеет вид

$$\chi_k(r) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} S^{-1/2} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{i} [(a+b)^* - S(a+b)] \cos kr + [(b-a)^* + S(b-a)] \sin kr \right\}. \quad (3.5)$$

Чтобы она была регулярна в нуле, коэффициент перед косинусом должен исчезать. Из этого условия определим с помощью (3.2) матрицу рассеяния:

$$S(k) = e^{2i\delta} = \frac{a^* + b^*}{a + b} = e^{-2ikR} \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \frac{e^{-2\kappa \rho} + \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \zeta(k)}{e^{-2\kappa \rho} + \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \zeta(k)}, \quad (3.6)$$

где

$$\zeta(k) = \frac{k \operatorname{ctg} kR_1 + \kappa}{k \operatorname{ctg} kR_1 - \kappa}.$$

Если барьер достаточно высок и широк, так что $\chi\rho \gg 1$, то $e^{-2\chi\rho}$ очень мало, и, опуская его в (3.6), получаем

$$S(k) = e^{-2ikR} \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik}. \quad (3.7)$$

Отбросить $e^{-2\chi\rho}$ в формуле (3.6) для $S(k)$ можно везде, кроме окрестности точки $k = k_n$, где $\zeta(k)$ обращается в нуль. Исследуем эту область. Разложение $\zeta(k)$ в ряд по степеням $(k - k_n)$ записывается так:

$$\zeta(k) = \frac{k - k_n}{2k_n} \left[1 + \left(\frac{k_n}{\kappa_n} \right)^2 \right] (1 + \kappa_n R_1); \quad \kappa_n = \sqrt{\kappa_0^2 - k_n^2}. \quad (3.8)$$

Таким образом, знаменатель в (3.6) равен

$$e^{-2\chi\rho} + \frac{\kappa_n - ik_n}{\kappa_n + ik_n} \left[1 + \left(\frac{k_n}{\kappa_n} \right)^2 \right] (1 + \kappa_n R_1) \frac{k - k_n}{2k_n} \quad (3.9)$$

и обращается в нуль при $k = k_0$:

$$k_0 = k_n - e^{-2\chi\rho} \frac{2k_n \kappa_n^2 (\kappa_n + ik_n)^2}{(\kappa_n^2 + k_n^2)^2 (1 + \kappa_n R_1)} \equiv k_1 - ik_2. \quad (3.10)$$

Следовательно, $S(k)$ имеет полюс при $k = k_0$; как видно из формулы для k_0 , полюс расположен в нижней полуплоскости. Используя (3.9), (3.10), запишем $S(k)$ вблизи полюса в следующем виде:

$$S(k) \equiv e^{-2ikR} \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} \frac{k + k_0^*}{k - k_0}. \quad (3.11)$$

В непосредственной близости к полюсу первые два множителя можно считать постоянными и положить

$$e^{2i\varphi} = e^{-2ik_1 R} \frac{\kappa + ik_1}{\kappa - ik_1}. \quad (3.12)$$

Переходя от волновых векторов к энергиям, перепишем S как

$$S(E) = e^{2i\varphi} \frac{E - E_0 - i\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2}, \quad (3.13)$$

где резонансная энергия E_0 и ширина Γ равны ($e^{-2\chi\rho} \ll 1$):

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}; \quad \Gamma = 16E_0 e^{-2\chi\rho} \frac{\kappa_n^3 k_n}{(\kappa_n^2 + k_n^2)^2 (1 + \kappa_n R_1)}. \quad (3.14)$$

Поучительно рассмотреть физическую причину возникновения квазистационарных состояний. Устремим правый край R потенциального барьера к бесконечности. В этом случае полюс k_0 будет стремиться к k_n , и в пределе мы получим потенциал, который изображен на рис. 25 пунктирной линией. Очевидно, что у такого потенциала спектр при $k < \kappa_0$ становится дискретным. Исчезают все состояния, кроме одного, при $k = k_n$, когда выполнено условие

$$k_n \operatorname{ctg} k_n R_1 + \kappa_n = 0,$$

при котором волновая функция на бесконечности затухает как $e^{-\kappa_n r}$. Таким образом, в пределе $R \rightarrow \infty$ на месте квазистационарного возникает истинно стационарное состояние.

Пусть теперь R — большое, но конечное число. В этом случае истинное стационарное состояние существовать не может, так как частицы из внутренней области $r < R$ благодаря туннельному эффекту могут просочиться под барьером и уйти на бесконечность. Вместо стационарного состояния в этом случае возникает квазистационарное. Поскольку вероятность «просачивания» при больших значениях $\chi\rho$ очень мала, то время распада T очень велико. Ясно, что если речь идет о малых промежутках времени, когда возможностью распада можно пренебречь, нестабильное состояние можно рассматривать как обычное стабильное. Иными словами, мы можем определить «квазистационарное» состояние как состояние, возникающее вместо стационарного при появлении возможности распада.

Используя рассуждения предыдущего параграфа, легко оценить время жизни T :

$$T \approx T_0 \frac{\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}; \quad T_0 = \frac{2\hbar}{\Gamma}.$$

Физически ясно, что говорить о квазистационарном состоянии можно, лишь если T превышает время свободного пролета $\tau = R/v_0$. Это условие выполняется в некоторой области энергией ΔE вокруг E . Предполагая,

что $T_0/\tau \gg 1$, элементарно получаем

$$|\Delta E| \leq \frac{\Gamma}{2} \sqrt{\frac{T_0}{\tau}}.$$

Отсюда ясно, что понятие «квазистационарное состояние» не является строго определенным. Для образования сравнительно долгоживущего состояния при рассеянии частицы на потенциале с барьером необходимо лишь, чтобы энергия частицы отличалась от E_0 не больше чем на ΔE . Именно в этом смысле говорят, что квазистационарное состояние с шириной Γ не обладает фиксированной энергией, а «размазано» по некоторому интервалу энергий $\sim \Gamma \sqrt{T_0/\tau} > \Gamma$.

Для иллюстрации разберем следующий пример. Пусть, кроме квазистационарного состояния с энергией E_0 и шириной Γ , имеется также связанное состояние с энергией E_1 . Рассмотрим процесс, в котором рассеиваемая на этом потенциале частица с энергией E испускает γ -квант, переходя при этом в связанное состояние с энергией E_1 (радиационный захват). Вероятность $\psi(E)$, как всегда, определяется квадратом матричного элемента

$$\psi(E) \sim |\langle \chi_E, \hat{O} \chi_1 \rangle|^2,$$

где \hat{O} — оператор электромагнитного перехода, а χ_1 — волновая функция связанного состояния, отличная от нуля только в небольшой области вокруг потенциала. Поэтому и энергетическая зависимость $\psi(E)$ в основном определяется величиной $\overline{\chi_E^2}$:

$$\psi(E) = \text{const} \cdot \overline{\chi_E^2} \approx \text{const} \cdot \frac{\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}.$$

Если рассеивается монохроматический пучок частиц, то испускаются монохроматические γ -кванты с энергией $E - E_1$. Но вероятность выхода γ -квантов, как видно из только что написанной формулы, сильно зависит от энергии частиц. $\psi(E)$ велико только тогда, когда E близко к E_0 . Предположим теперь, что на силовой центр падает пучок частиц с различными значениями E , причем разброс по энергиям $\Delta E \gg \Gamma$. Радиационный захват будут претерпевать лишь частицы, энергии которых близки

к E_0 . Соответственно этому энергия γ -квантов будет близка к $E_0 - E_1$, и их спектр будет иметь вид, схематически изображенный на рис. 29. Ширина резонансной кривой определяется формой кривой $\psi(E)$ и равна Γ .

Итак, ширина спектра γ -квантов определяется двумя факторами: разбросом энергии ΔE в пучке падающих частиц и шириной Γ резонансного уровня. При $\Delta E = 0$ все кванты обладают одной и той же энергией $E - E_1$. При увеличении ΔE от нуля до Γ разброс в энергиях квантов также возрастает. При дальнейшем увеличении ΔE , однако, разброс не увеличивается, оставаясь все время на уровне $\sim \Gamma$. Таким образом, при $\Gamma \rightarrow 0$ кванты всегда можно считать монохроматическими вне зависимости от величины ΔE . Картина выглядит так, как если бы рассеиваемые частицы захватывались на практически стабильное состояние с энергией E_0 , а затем, испуская квант, переходили в нижнее состояние χ_1 .

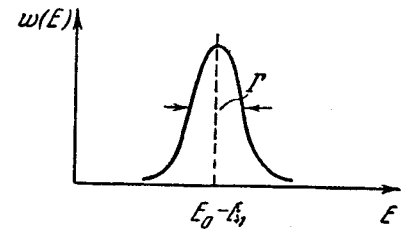


Рис. 29.

При малой, но конечной величине Γ говорят, что квазистационарное состояние не обладает определенным значением энергии. Здесь важно подчеркнуть, что в каждом единичном акте образуется состояние с точно фиксированной энергией E , равной энергии налетающей частицы. О неопределенности энергии квазистационарного состояния можно говорить лишь в том смысле, что для всех значений энергии E в интервале $|E - E_0| \leq \Gamma$ возможно образование сравнительно долго живущего состояния.

Выше был выведен ряд общих формул для квазистационарных состояний. При их выводе учитывалась лишь энергетическая зависимость волновой функции, связанная с полюсным членом в $S(k)$. Все остальные величины считались постоянными. Если же нас интересуют области энергий, расположенные не очень близко к полюсу ($|E - E_0| > \Gamma$), то такая процедура уже не очень надежна и при вычислении энергетических зависимостей

всех физических величин необходимо учитывать конкретный вид потенциала. Иными словами, в таких случаях уже нельзя вводить общее понятие о «квазистационарном» состоянии, которое зависит от потенциала только через E_0 и Γ . Строгой границы между действительными «квазистационарными» состояниями и состояниями, существенно зависящими от вида потенциала, не существует. Разные авторы помещают ее в разных местах соответственно своим вкусам и наклонностям. Зачастую эта граница определяется желанием интерпретировать экспериментальные данные в пользу одной из нескольких альтернативных теоретических возможностей.

Во избежание недоразумений мы везде ниже, делая какое-нибудь утверждение о «квазистационарных» состояниях, будем понимать это утверждение лишь в том смысле, что оно строго выполняется в пределе $\Gamma \rightarrow 0$.

§ 4. Распад квазистационарного состояния

Мы видели, что при строгом рассмотрении квазистационарного состояния неизбежно должен входить и конкретный физический процесс образования состояния. Если речь идет, например, о рассеянии частицы на потенциале с образованием «квазистационарного» промежуточного состояния, то этот процесс описывается функцией $\chi_k(r)$ предыдущих параграфов, соответствующей задаче о рассеянии. «Квазистационарность» проявляется здесь как очень большое значение волновой функции внутри барьера. Задачам, связанным с образованием квазистационарного состояния в реакциях, также соответствуют совершенно специфические волновые функции. Наконец, можно поставить вопрос о распаде квазистационарного состояния*). Такой постановке задачи также соответствует своя волновая функция. В этом параграфе мы ее получим и постараемся проанализировать. При этом будем следовать методу Г. Ф. Друкарева (1951).

Задачу ставим следующим образом. Пусть имеется потенциал с барьером (типа, изображенного на рис. 25).

*) Различные аспекты процесса распада квазистационарного состояния рассмотрены в ряде работ (И. Петцольд, 1959; Х. Нуссенцвейг, 1961; Р. Винтер, 1961; Л. Розенфельд, 1965).

В момент времени $t = 0$ волновая функция внутри барьера равна $\chi_0(r)$ и равна нулю под барьером и вне его. Требуется найти развитие волновой функции во времени, т. е. найти $\chi(r, t)$ при $t > 0$. Это — нестационарная задача, и для ее решения необходимо обратиться к временному у. Ш.

$$i\hbar\dot{\chi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi'' + U\chi \quad (4.1)$$

с начальным условием $\chi|_{t=0} = \chi_0$ и, естественно, с требованием конечности волновой функции при всех r и t . Поступим, как обычно: будем искать $\chi(r, t)$ в виде разложения

$$\chi(r, t) = \int_0^\infty dk c(k) \chi_k(r) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}, \quad (4.2)$$

где $\chi_k(r)$ — нормированные на $\delta(k - k_1)$ решения стационарного уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi_k'' + U\chi_k = E\chi_k.$$

Эти решения, как мы уже знаем, имеют вне радиуса действия потенциала вид

$$\begin{aligned} \chi_k &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta(k)) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2i} (S^{1/2}(k) e^{ikr} - S^{-1/2}(k) e^{-ikr}). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Функцию $c(k)$ в (4.2) определяем из начального условия:

$$c(k) = \int_0^\infty dr \chi_0 \chi_k. \quad (4.4)$$

Зависимость функции $c(k)$ от k должна быть, очевидно, такой же, как и у волновых функций χ_k . Это означает, что $c(k)$ можно представить в виде (сравни с (4.3))

$$c(k) = \frac{1}{i} (\alpha(ik) S^{1/2}(k) - \alpha(-ik) S^{-1/2}(k)), \quad (4.5)$$

где $\alpha(ik)$ — какая-то плавная функция k . Выписанные выше формулы показывают, что подынтегральное

выражение в (4.2) является четной функцией k . Используя это, приводим (4.2) к следующему виду:

$$\chi(r, t) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk [\alpha(ik) S(k) - \alpha(-ik)] e^{ikr - \frac{iEt}{\hbar}}. \quad (4.6)$$

Удобно ввести новую переменную

$$y = \sqrt{\frac{i\hbar t}{2m}} \left(k - \frac{mr}{\hbar t} \right). \quad (4.7)$$

Произведя преобразование переменных в (4.6), получаем

$$\chi(r, t) = B \int_{-\sqrt{i} \infty}^{\sqrt{i} \infty} dy e^{-y^2} [\alpha(ik(y)) S(k(y)) - \alpha(-ik(y))], \quad (4.8)$$

$$B \equiv -\sqrt{\frac{m}{i\pi\hbar t}} e^{\frac{imr^2}{2\hbar t}}.$$

Путь интегрирования в этом интеграле (рис. 30) расположен очень неудобно, так как везде вдоль него e^{-y^2} является осциллирующей величиной. Поэтому сместим путь интегрирования на действительную ось. При этом e^{-y^2} будет быстро спадать как в сторону положительных, так и в сторону отрицательных y .

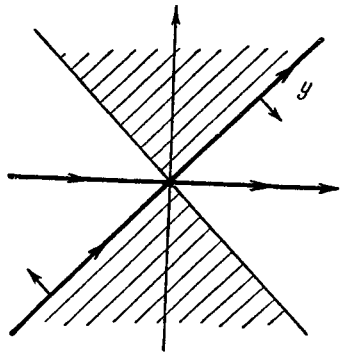


Рис. 30.

Функции α гладкие, они не содержат никаких особенностей, которые могли бы помешать деформации пути интегрирования. Другое дело функция $S(k)$, относительно которой мы наверняка знаем, что

она имеет особенности. Посмотрим, где они расположены.

Наиболее общее выражение для $S(k)$ в случае одного квазистационарного состояния есть (см. (2.2))

$$S(k) = S_0(k) \frac{(k - k_0^*)(k + k_0)}{(k - k_0)(k + k_0^*)}.$$

Здесь $S_0(k)$ — некая гладкая функция k , а k_0 — положение полюса. Переходя к переменной y , находим

$$S(k(y)) = S_0(k(y)) \frac{\left(y + \sqrt{\frac{i\hbar t}{2m}} \left(\frac{mr}{\hbar t} - k_0^* \right) \right) \left(y + \sqrt{\frac{i\hbar t}{2m}} \left(\frac{mr}{\hbar t} + k_0 \right) \right)}{\left(y + \sqrt{\frac{i\hbar t}{2m}} \left(\frac{mr}{\hbar t} - k_0 \right) \right) \left(y + \sqrt{\frac{i\hbar t}{2m}} \left(\frac{mr}{\hbar t} + k_0^* \right) \right)}. \quad (4.9)$$

Надо различать два случая.

1. $r > v_p t$, где v_p — скорость, отвечающая резонансной энергии: $v_p = \frac{\hbar k_1}{m}$, k_1 — действительная часть k_0 : $k_0 \equiv k_1 - ik_2$. В этом случае полюса функции $S(k(y))$ лежат в заштрихованных областях на рис. 30 и не мешают перемещению контура интегрирования на действительную ось. Из-за наличия в подынтегральном выражении (4.8) экспоненты e^{-y^2} основной вклад в интеграл дает область $y \approx 0$, и мы приближенно получаем

$$\chi_n(r, t) = B \sqrt{\pi} S^{1/2}(k(0)) ic(k(0)), \quad (4.10)$$

где индекс «н» отвечает нерезонансному случаю. Здесь $S(k)$ и $c(k)$ должны браться при таком значении аргумента k , которому соответствует равенство $y = 0$, т. е. $k(0) = mr/\hbar t$. Таким образом, $k(0)$ — это то значение волнового вектора k , которым должна обладать частица, вылетевшая в момент $t = 0$ из начала координат и попавшая к моменту t в точку r .

Как видно из (4.10), значение функции $\chi_n(r, t)$ целиком определяется коэффициентом $c(k(0))$, показывающим, какая доля начального состояния соответствует частицам с волновым вектором $k(0)$. Таким образом, χ_n описывает частицы, покинувшие начало координат в момент $t = 0$, т. е. сразу же после образования начального состояния χ_0 . Физически это означает, что частицы с таким k покидают область с отличным от нуля потенциалом мгновенно, не задерживаясь.

Более сложная картина возникает, если выполняется неравенство

2. $r < v_p t$. В этом случае r и t таковы, что в точке r мы можем наблюдать не только быстрые частицы

с $v > v_p$, но и частицы со скоростями $v \leq v_p$. Как видно из (4.9), полюса в $S(k(y))$ теперь располагаются так, что один из них мешает перемещению контура интегрирования на действительную ось. Это — полюс, расположенный в незаштрихованной области рис. 31 в точке

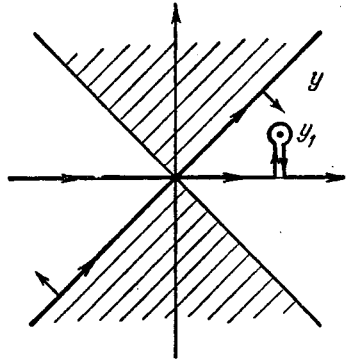


Рис. 31.

$$y_1 = \sqrt{\frac{i\hbar t}{2m}} \left(\frac{m}{\hbar} \left(v_p - \frac{r}{t} \right) - ik_0 \right).$$

Соответственно этому при вычислении интеграла (4.6) возникают два члена: один из вкладов в интеграл дает область $y = 0$; при этом мы получаем член, полностью аналогичный χ_n в (4.10); второй вклад в интеграл дает полюс. В результате мы получим

$$\left. \begin{aligned} \chi(r, t) &= \chi_n(r, t) + \chi_p(r, t), \\ \chi_p(r, t) &= -2\pi i B \alpha(ik_0) e^{-y_1^2} \text{Res } S(k(y_1)). \end{aligned} \right\} (4.11)$$

Первый член χ_n имеет здесь тот же самый смысл, что и раньше. Он соответствует частицам со скоростью $v = \frac{r}{t}$, мгновенно вылетевшим из области действия потенциала.

Второй член гораздо интереснее. Несмотря на то, что полюс $y = y_1$ расположен далеко от действительной оси, он дает большой вклад в интеграл, и отвечающий ему второй член может оказаться гораздо больше первого. Это объясняется тем, что в точке полюса e^{-y^2} не мало. Возвращаясь от y к переменной k , запишем дополнительный член в (4.11) в виде

$$\chi_p(r, t) = \sqrt{2\pi} \alpha(ik_0) S_0(k_0) \frac{\Gamma}{2\hbar v_p} e^{ik_0 r - \frac{iE_0 t}{\hbar} - \frac{\Gamma}{2\hbar} \left(t - \frac{r}{v_p} \right)}. (4.12)$$

Все плавные функции здесь берутся в точке $k = k_0$, т. е. в точке полюса, отвечающего квазистационарному состоянию; χ_p имеет вид бегущей волны, передний фронт которой распространяется со скоростью v_p .

Оценим величины коэффициентов $c(k)$ и $\alpha(ik_0)$, входящих в χ_n и χ_p . Для $c(k)$ имеем

$$c(k) = \int_0^R \chi_0 \chi_k dr \sim \bar{\chi}_0 R (4.13)$$

(R — радиус потенциала). Чтобы дать оценку для $\alpha(ik_0)$, заметим, что при $k \approx k_0$ функцию χ_k можем представить в виде $A(k) \chi^{(0)}(r)$, где $\chi^{(0)}$ нормирована на единицу (см. (2.5)), а $A^2(k)$ имеет полюс в точке $k = k_0$ (см. (2.7)). Следовательно, имеем цепочку равенств

$$\begin{aligned} c(k) &= \frac{1}{i} (\alpha(ik) S^{1/2}(k) - \alpha(-ik) S^{-1/2}(k)) \sim \\ &\sim A \int_0^R \chi_0 \chi^{(0)} dr \sim A \bar{\chi}_0 \sqrt{R}. \end{aligned}$$

Так как при $k \rightarrow k_0$ $S^{-1}(k) \rightarrow 0$, то отсюда следует:

$$\begin{aligned} \alpha(ik_0) &= i \bar{\chi}_0 \sqrt{R} \lim_{k \rightarrow k_0} S^{-1/2}(k) A(k) = \\ &= -\bar{\chi}_0 \sqrt{R} S_0^{-1/2}(k) \sqrt{\frac{\hbar v_p}{2\pi\Gamma}}. \end{aligned} (4.14)$$

Отметим аналогию между $c(k)$ и $\alpha(ik_0)$. Введем для этого решение

$$\tilde{\chi}_k(r) = 2i \sqrt{\frac{\pi}{2}} S^{-1/2} \chi_k(r) \sim e^{ikr} - S^{-1}(k) e^{-ikr},$$

которое при $k \rightarrow k_0$ переходит в решение χ_p , отвечающее комплексному собственному значению энергии $E_0 - i\Gamma/2$ и асимптотически ведущее себя как $e^{ik_0 r}$. Соответствующий интеграл перекрытия \bar{c} равен

$$\begin{aligned} \bar{c} &= \int \tilde{\chi}_k \chi_0 dr = i \sqrt{2\pi} S^{-1/2} c(k) = \\ &= \sqrt{2\pi} (\alpha(ik) - \alpha(-ik) S^{-1}(k)). \end{aligned}$$

Переходя в этом равенстве к пределу $k \rightarrow k_0$, получаем

$$\alpha(ik_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \chi_p \chi_0 dr. (4.15)$$

Таким образом, и $c(k)$ и $\alpha(ik_0)$ — это интегралы перекрытия с χ_0 , но для разных функций: $c(k)$ — для функций с действительными E , а $\alpha(ik_0)$ — для функции, отвечающей комплексному собственному значению энергии.

При анализе формул (4.10) — (4.15) нужно помнить условия, при которых они получены: при вычислении интеграла (4.8) считалось, что подинтегральное выражение (за исключением e^{-y^2}) слабо зависит от y при $y \sim 0$. Это справедливо, если все величины, входящие в подинтегральное выражение (4.8), мало меняются при изменении y на единицу.

Изменению y на $\Delta y \sim 1$ соответствует изменение

$$\Delta k \sim \left(\frac{2m}{\hbar t}\right)^{1/2}.$$

Для правомочности вычислений необходимо, чтобы Δk было меньше, чем интервал δk , внутри которого $S(k)$ и $\alpha(ik)$ можно считать постоянными.

В ядерной физике характерный интервал неравномерностей составляет 1 кэв, а энергии порядка 1 Мэв; δk равно

$$\delta k = \frac{\delta E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

Отсюда находим время t , начиная с которого $\Delta k < \delta k$:

$$t > \frac{4E\hbar}{(\delta E)^2} = \frac{10^{-6} \cdot 10^{-27}}{10^{-18}} = 10^{-15} \text{ сек.}$$

В атомных явлениях $\delta E \sim 0,1 \text{ эв}$, $E \sim 10 \text{ эв}$,

$$t > \frac{10^{-11} \cdot 10^{-27}}{10^{-26}} = 10^{-12} \text{ сек.}$$

В физике элементарных частиц $\delta E \sim 10 \text{ Мэв}$, $E \sim \sim 1000 \text{ Мэв}$,

$$t > \frac{10^{-3} \cdot 10^{-27}}{10^{-10}} = 10^{-20} \text{ сек.}$$

Эти оценки показывают, что формулы (4.10) — (4.14) справедливы практически при всех доступных измерению временах. Лишь в первый момент после начала распада эти формулы неприменимы.

§ 5. Закон радиоактивного распада

Физический смысл формул предыдущего параграфа ясен: в момент времени $t = 0$ волновая функция $\psi_0(r)$ не соответствовала состоянию с определенной энергией. Вероятность найти частицу с энергией E (и соответственно с волновым вектором k) пропорциональна, согласно общим правилам квантовой механики, квадрату матричного элемента $\langle 0 | k \rangle = \int \psi_0^* \psi_k dr$. Поэтому с точки зрения элементарной физики следует ожидать, что картина «расплывания» начального состояния будет следующей: если частицы с энергией E не задерживаются внутри потенциального барьера, а сразу же из него вылетают, то через время t они будут находиться в точке $r = vt$. Это как раз то, что мы видим в (4.10) и в первом члене (4.11): амплитуда волновой функции в точке r пропорциональна амплитуде состояния с энергией E (соответствующей скорости $v = \hbar k/m$) в начальной волновой функции.

Если же энергия E близка к энергии E_0 квазистационарного состояния, то мы должны на основании элементарных кинематических соображений ожидать, что при $r > v_p t$ этих частиц еще наблюдаться не будет: они еще не успеют дойти до этой точки. При $r < v_p t$, однако, эти частицы должны наблюдаться при всех r , так как если состояние живет в течение какого-то времени τ , то эти частицы будут наблюдаться не только в точке $r = v_p t$, но и в точке $r = v_p(t - \tau)$. Если частица живет время τ с вероятностью $P(\tau)$, то плотность частиц (на расстоянии r от источника в момент времени t) должна быть пропорциональна $P\left(\tau - \frac{r}{v_p}\right)$. Именно такому случаю и соответствует второй, резонансный член в (4.11). Более того, из вида этого члена можно заключить, что при энергии $E \sim E_0$ образуется «квазистационарное» состояние, вероятность распада которого в момент τ после образования пропорциональна $e^{-\frac{\Gamma\tau}{\hbar}}$. Мы приходим, таким образом, к известному закону радиоактивного распада. Распределение плотности вероятности

частиц $|\psi(r, t)|^2$ в момент времени t имеет вид, изображенный на рис. 32. Максимум при малых r соответствует области внутри барьера, а максимум при больших r отвечает распаду «квазистационарного» состояния при $t=0$ сразу же после его образования; этот максимум движется со скоростью v_p . Из-за непрерывного распада плотность частиц в квазистационарном состоянии постепенно уменьшается. Справа, т. е. при $r > v_p t$, плотность вероятности меньше, так как «распадные» частицы еще не успели дойти туда.

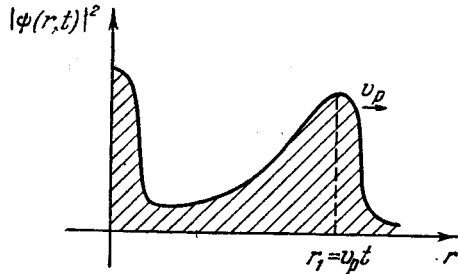


Рис. 32.

Непрерывный «фон» частиц при $r > v_p t$ обязан тому, что в начальном распределении присутствуют частицы любых энергий.

Напомним здесь, что в стационарной теории в качестве волновой функции квазистационарного состояния обычно берут то решение $\varphi_{k_0}(r, t)$ у.Ш., которое удовлетворяет граничному условию при $r=0$, а при $r \rightarrow \infty$ ведет себя как $e^{ik_0 r - i(E_0 - \frac{i\Gamma}{2})\frac{t}{\hbar}}$ (k_0 — комплексно). С другой стороны, при действительных k мы имеем волновую функцию задачи о рассеянии, которая асимптотически равна

$$\chi_k(r) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \sim \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{\pi}} (e^{ikr} S^{1/2}(k) - e^{-ikr} S^{-1/2}(k)) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (5.1)$$

Квазистационарному состоянию соответствует полюс $S(k)$. Разделив $\chi_k(r)$ на $\frac{1}{i\sqrt{2\pi}} S^{1/2}(k)$, получим, что при $k \rightarrow k_0$ второй член пропадает и

$$\frac{i\sqrt{2\pi}}{S^{1/2}(k)} \chi_k(r) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \xrightarrow{k \rightarrow k_0} \varphi_{k_0}(r, t). \quad (5.2)$$

Таким образом, оба типа решений тесно связаны друг с другом. Польза введения функций φ_{k_0} очевидна. Прежде всего, значение k_0 , при котором у.Ш. допускает решение типа φ_{k_0} , сразу определяет положение и ширину квазистационарного состояния. Кроме того, сравнивая (5.2) с (4.12), мы видим, что φ_{k_0} при $r < v_p t$ правильно передает зависимость истинной волновой функции $\psi(r, t)$ распадного состояния от r и t (здесь t отсчитывается от момента создания распадного состояния).

В литературе довольно часто дискутируется вопрос о том, экспоненциален ли радиоактивный распад или нет (Л. А. Халфин, 1956, 1957; Ю. Швингер, 1960В; Р. Ньютон, 1961). По этому поводу можно сказать следующее. Из формулы (4.11) предыдущего параграфа следует, что $|\psi(r, t)|^2$ убывает как функция времени неэкспоненциально. Это понятно, так как, задав произвольно начальное состояние $\psi_0(r)$, мы создаем суперпозицию квазистационарного состояния, экспоненциально затухающего, и пакета частиц, обладающего непрерывным спектром, которые и дают неэкспоненциальный первый член в (4.11)*. Такое явление физически неизбежно.

Если доминирующим в $\psi(r, t)$ является резонансный член, как это почти при всех условиях и бывает, то распад экспоненциален. В том, что резонансный член почти всегда является основным, нетрудно убедиться. Используя приведенные в этой главе формулы, легко оценить отношение квадратов модулей первого и второго членов в волновой функции (4.11) при $r \ll v_p t$. По порядку величины это отношение равно

$$\rho \equiv \left| \frac{\psi_{II}}{\psi_p} \right|^2 \sim \frac{\hbar}{E_0 t} e^{\Gamma t/\hbar} = \frac{\Gamma}{E_0} \frac{t_0}{t} e^{t/t_0}, \quad t_0 = \frac{\hbar}{\Gamma}. \quad (5.3)$$

Зависимость этой величины от t схематически изображена на рис. 33, из которого видно, что нерезонанс-

*) При использовании полной системы стационарных состояний неэкспоненциальность распада следует из теоремы Н. С. Крылова, В. А. Фока (1947) (согласно которой закон распада полностью определяется энергетическим спектром начального состояния), поскольку этот спектр ограничен снизу.

ный член в волновой функции больше резонансного лишь при очень малых ($t < t_1$) или при очень больших ($t > t_2$) временах. Для t_1 и t_2 имеем приближенно

$$\left. \begin{aligned} t_1 &\approx t_0 \frac{\Gamma}{E_0}, \\ t_2 &\approx t_0 \ln \frac{E_0}{\Gamma}. \end{aligned} \right\} \quad (5.4)$$

При промежуточных значениях времени доминирующим оказывается резонансный член. Это означает, что для всех t в пределах $t_1 < t < t_2$ распад можно считать экспоненциальным.

В практически наиболее интересных случаях α -распада $E_0 \approx 1 \text{ Мэв} \approx 10^{-6} \text{ эрг}$, $t_0 \geq 1 \text{ сек}$, $\Gamma \leq 10^{-15} \text{ эв} \approx 10^{-27} \text{ эрг}$. Отсюда получаем

$$t_1/t_0 \sim 10^{-21}; \quad t_2/t_0 \sim 50. \quad (5.5)$$

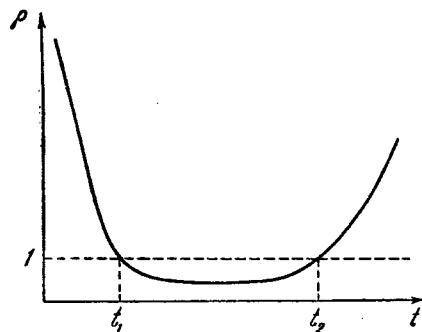


Рис. 33.

Из этих оценок следует, что α -распад с колоссальной точностью должен следовать экспоненциальному закону. Отклонение от экспоненциальности могло бы наблюдаться лишь в первое мгновение после создания распадного состояния либо же при очень больших временах ($t > 50 t_0$), когда от распадающегося вещества уже практически ничего не осталось ($e^{-50} \approx 10^{-20}$).

Итак, радиоактивный распад экспоненциален, если ширина Γ достаточно мала ($\Gamma \ll E_0$). В задачах ядерной физики E_0 по порядку величины равна 1 Мэв и для экспоненциальности распада необходимо, чтобы $\Gamma \ll 1 \text{ Мэв}$. В физике элементарных частиц $E_0 \sim 100 - 1000 \text{ Мэв}$. В атомной физике $E_0 \sim 10 \text{ эв}$. В этих случаях имеем соответственно $\Gamma \ll 100 - 1000 \text{ Мэв}$ и $\Gamma \ll 10 \text{ эв}$.

Нужно, однако, всегда помнить, что при этом было использовано очень существенное предположение. При выводе формул предыдущего параграфа считалось, что

величины $\langle 0|k \rangle = \int \psi_0^* \psi_k dr$, S_0 и α слабо зависят от k . Это не всегда так. Можно создать волновой пакет с разбросом по энергии

$$\Delta E \ll \Gamma$$

и средним значением \bar{E} где-нибудь в интервале $[E_0 - \Gamma, E_0 + \Gamma]$. В этом случае все выписанные выше величины типа S_0 , α будут очень сильно меняться в области вокруг \bar{E} и, как нетрудно убедиться прямым расчетом, в точности аналогичным проделанному в предыдущем параграфе, закон распада не будет иметь ничего общего с экспоненциальным.

Можно сказать по-другому, что при $\Delta E \gg \Gamma$ вероятность образования квазистационарного состояния с энергией E не зависит от ΔE и дается формулой

$$\omega(E) \sim \frac{\Gamma/2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}$$

(распределение такого вида называется распределением Лоренца).

Если распределение вероятности не лоренцево, то нет и экспоненциального закона распада. Этот случай легко осуществляется на практике. Пусть, например, атом находится во втором возбужденном состоянии, ширина которого Γ_2 много меньше ширины Γ_1 первого возбужденного состояния. Пусть при этом возможен каскадный γ -переход: система излучает квант γ_2 (энергия $\hbar\omega_2$) и переходит на первый уровень, с которого затем путем излучения кванта γ_1 (энергия $\hbar\omega_1$) переходит на основное состояние. Энергия кванта γ_2 может быть измерена. Пусть эксперимент ставится таким образом, что $\hbar\omega_2$ измеряется с точностью $\Delta(\hbar\omega_2) \ll \Gamma_1$. При этом первый уровень заселяется отнюдь не по лоренцеву закону; заселяется лишь какая-то его часть. В этом случае временная зависимость распада первого уровня не будет иметь ничего общего с экспонентой.

Если, однако, $\Gamma_2 \gg \Gamma_1$ и второй уровень заселен весь (т. е. во всем интервале $\Delta E \sim \Gamma_2$), то первый уровень всегда заселяется по лоренцеву закону и распадается экспоненциально.

§ 6. Обобщение нормировки и теория возмущений для квазистационарных состояний

До сих пор мы в основном говорили о специфических распадных свойствах квазистационарных состояний. Формально эти состояния находятся в непрерывном спектре, однако из-за достаточно большого времени жизни они обладают рядом физических и формальных свойств, сближающих их с истинно стационарными состояниями. В частности, можно ввести эффективный нормировочный интеграл для квазистационарных состояний и получить ряд результатов, очень близких к аналогичным результатам для стационарных состояний.

При описании теории возмущений для квазистационарных состояний*) мы будем следовать работе Я. Б. Зельдовича (1960).

Пусть в невозмущенном потенциале $V(r)$ частица имеет квазистационарное состояние в точке $k_0 = k_1 - ik_2$. Добавим к потенциалу возмущение δV . Как изменятся величины k_1 и k_2 (т. е. положение E_0 и ширина Γ резонанса)? Эту задачу можно решить следующим образом.

Введем вместо волновой функции $\chi_k(r)$ ее логарифмическую производную

$$z_k(r) = \frac{\chi'_k(r)}{\chi_k(r)}, \quad \chi_k(r) = \exp \left\{ \int_0^r z_k(r') dr' \right\}.$$

С помощью у. Ш., которому удовлетворяет $\chi_k(r)$, легко найти уравнение для z_k :

$$z'_k(r) + z_k^2(r) + (k^2 - V) = 0. \quad (6.1)$$

Так как для состояния с моментом l регулярная в нуле функция χ_{k_0} всегда ведет себя при малых r , как ar^{l+1} , где $a = \text{const}$, то $z(r) \rightarrow \frac{l+1}{r}$ независимо от вида

*) Такая теория впервые была развита в работе П. Капура и Р. Пайерлса (1938). Вопрос о разложении волновой функции непрерывного спектра в ряд по системе волновых функций квазистационарных состояний рассмотрен в работе В. И. Сердобольского (1959).

потенциала. При больших r интересующее нас решение ведет себя как $e^{ik_0 r}$ и $z(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} ik_0$.

Введем возмущение δV . При этом у z_k появляется приращение δz_k ; кроме того, смещается и положение квазистационарного уровня: $k_0 \rightarrow k_0 + \delta k_0$. Из (6.1) для δz_k находим уравнение

$$(\delta z_k)' = -2z_k \delta z_k + \delta V - 2k_0 \delta k_0. \quad (6.2)$$

Поскольку предел $z(r)$ при $r \rightarrow 0$ не зависит от k , δz_k должно удовлетворять граничному условию

$$\delta z_k(0) = 0. \quad (6.3)$$

Решение уравнения (6.2), удовлетворяющее этому условию, как легко видеть, имеет вид

$$\begin{aligned} \delta z_k(r) = \exp \left\{ -2 \int_0^r z_{k_0} dr \right\} \times \\ \times \int_0^r \left\{ [\delta V(r') - 2k_0 \delta k_0] \exp \left[2 \int_0^{r'} z_{k_0}(r'') dr'' \right] \right\} dr' = \\ = \frac{\int_0^r [\delta V(r') - 2k_0 \delta k_0] \chi_{k_0}^2(r') dr'}{\chi_{k_0}^2(r)}. \quad (6.4) \end{aligned}$$

При больших r , когда $\chi_{k_0} \sim Ce^{ik_0 r}$, логарифмическая производная всегда равна ik_0 , и $\delta z(\infty) = i\delta k_0$ как раз дает поправку к энергии и ширине квазистационарного состояния. Из (6.4) в этом случае следует (при $l=0$)

$$i\delta k_0 (Ce^{ik_0 r})^2 = -2k_0 \delta k_0 \int_0^r \chi_{k_0}^2(r') dr' + \int_0^r \delta V \chi_{k_0}^2(r') dr',$$

что можно переписать как

$$2k_0 \delta k_0 \equiv \delta k_0^2 = \frac{\int_0^r \chi_{k_0}^2 \delta V dr'}{\int_0^r \chi_{k_0}^2 dr' - \frac{\chi_{k_0}^2}{2ik_0}}. \quad (6.5)$$

Заметим, что, строго говоря, эта формула верна, лишь если V и δV обращаются в нуль начиная с какого-то значения радиуса $r = R$. Только в этом случае можно считать, что: а) при достаточно больших r функция $Ce^{ik_0 r} = \chi_{k_0}$ и б) можно распространить верхний предел интегрирования до бесконечности.

Формула (6.5) решает нашу задачу. При введении возмущения изменяются положение и ширина квазистационарного состояния:

$$E_0 - \frac{i\Gamma}{2} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} (k_0 + \delta k_0)^2.$$

Формула (6.5) очень похожа на обычную формулу теории возмущений для сдвига уровня; имеются только два отличия: во-первых, в нее входят квадраты волновых функций $\chi_{k_0}^2$, а не квадраты модулей $|\chi_{k_0}|^2$; во-вторых, в обычной формуле в знаменателе стоит нормировочный интеграл $\int_0^\infty |\chi_k|^2 dr$, а не то, что в (6.5).

В связи с этим заметим, что интеграл $\int_0^\infty |\chi_{k_0}|^2 dr$ расходится, поскольку подынтегральное выражение экспоненциально возрастает при $r \rightarrow \infty$. Интеграл $\int_0^\infty \chi_{k_0}^2 dr$ в

обычном смысле слова также не существует, однако подынтегральное выражение возрастает при $r \rightarrow \infty$, осциллируя, и, как мы сейчас покажем, этот интеграл можно регуляризовать. Для этого недостаточно умножить подынтегральную функцию на $e^{-\alpha r}$ и устремить затем α к нулю. Можно, однако, показать, что существует

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty \chi_{k_0}^2(r) e^{-\alpha r} dr = \int_0^\infty [\chi_{k_0}^2 - (Ce^{ik_0 r})^2] dr - \frac{C^2}{2ik_0}, \quad (6.6)$$

в силу чего знаменатель в (6.5) можно рассматривать как нормировочный интеграл функции χ_{k_0} *).

Если поэтому мы условимся называть нормировочным интегралом предел

$$\int_0^\infty \chi_{k_0}^2 dr \equiv \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty \chi_{k_0}^2 e^{-\alpha r} dr, \quad (6.7)$$

то (6.5) можно переписать в более привычной форме:

$$\delta k_0^2 = \frac{\int_0^\infty \delta V \chi_{k_0}^2 dr}{\int_0^\infty \chi_{k_0}^2 dr}. \quad (6.8)$$

*) Действительно, как нетрудно видеть, интеграл выражается через функцию ошибок Φ :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-\alpha r^2 + 2i(k_1 - ik_0)r} dr &= \int_0^\infty e^{-\alpha r^2 + 2k_1 r} (\cos 2k_1 r + i \sin 2k_1 r) dr = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \left[1 - \Phi\left(-i \frac{k_0}{\sqrt{\alpha}}\right) \right] e^{-\frac{k_0^2}{\alpha}}. \end{aligned}$$

Поскольку $\alpha \rightarrow 0$, то для Φ можно воспользоваться асимптотическим выражением

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\alpha r^2 + 2ik_0 r} dr = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{k_0^2}{\alpha}} \frac{1}{\pi} e^{\frac{k_0^2}{\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{\alpha}}{k_0} = -\frac{1}{2ik_0}.$$

С другой стороны, при $R < r$

$$\begin{aligned} \int_0^r [\chi_{k_0}^2(r) - (Ce^{ik_0 r})^2] dr - \frac{C^2}{2ik_0} &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^r dr [\chi_{k_0}^2(r) - (Ce^{ik_0 r})^2] e^{-\alpha r} + \\ &+ \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^r e^{-\alpha r} (Ce^{ik_0 r})^2 dr = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \chi_{k_0}^2(r) dr. \end{aligned}$$

При этом мы воспользовались тем, что обрезая множитель $e^{-\alpha r}$ в первом интеграле при $\alpha \rightarrow 0$ в силу равенства нулю члена в квадратной скобке при $r > R$ не меняет значения этого интеграла.

Отметим тут же, что данное выше определение нормировочного интеграла для квазистационарных состояний оказывается полезным и в ряде других задач; так, например, в следующем параграфе будет показано, как с помощью этой техники можно найти коэффициент a , определяющий промежуточную асимптотику волновой функции.

§ 7. Асимптотика волновой функции при $r \rightarrow \infty$ и $t \rightarrow \infty$

Этот вопрос уже рассматривался выше, но нас в основном интересовало тогда выяснение физики процесса. Теперь мы остановимся на формальной стороне дела. Найдем асимптотический вид волновой функции $\psi(r, t)$ при $r \rightarrow \infty$, $t \rightarrow \infty$, если $\psi(r, 0) = \psi_0(r)$.

Эта задача была решена в работе Я. Б. Зельдовича (1960) методом Лапласа. Применим его к сферически-симметричной задаче, в которой потенциал $V(r)$, искомая $\psi(r, t)$ и начальная $\psi(r, 0)$ зависят только от r . Введем новую функцию $\psi(r, s)$:

$$\psi(r, s) = -i \int_0^{\infty} e^{ist} \psi(r, t) dt. \quad (7.1)$$

Полагая $s = \eta + i\sigma$, найдем, что

$$\psi(r, s) = -i \int_0^{\infty} e^{-\sigma t} \psi(r, t) e^{i\eta t} dt \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(r, t) e^{i\eta t} dt, \quad (7.2)$$

т. е. $\psi(r, s)$ есть фурье-образ функции, равной

$$\left. \begin{aligned} f(r, t) &= 0 && \text{при } t < 0, \\ f(r, t) &= -ie^{-\sigma t} \psi(r, t) && \text{при } t > 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.3)$$

По формулам обращения находим f и элементарно получаем

$$\psi(r, t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty+i\sigma}^{+\infty+i\sigma} \psi(r, s) e^{-ist} ds. \quad (7.4)$$

Интеграл (7.2) существует для f , убывающей при $t \rightarrow \infty$, т. е. для $\sigma > 0$. Однако мы будем рассматривать

также $\psi(r, s)$ и при $\sigma < 0$ как аналитическое продолжение функции $\psi(r, s)$, заданной интегралом при $\sigma > 0$.

Рассмотрим у. Ш.

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r, t) + U(r) \psi(r, t),$$

умножим его на $-ie^{ist}$ и проинтегрируем по времени. Получим

$$-\hbar s \psi(r, s) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r, s) + U(r) \psi(r, s) = -\hbar \psi_0(r). \quad (7.5)$$

При этом предполагается, что при $r > R$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{ist} \psi(r, t) = 0,$$

для чего нужно $\sigma > 0$, т. е. точка s должна находиться в верхней полуплоскости комплексного переменного s (рис. 34). Полагаем, что

$$\psi_0(r) = U(r) = 0 \quad \text{при } r > R. \quad (7.6)$$

Тогда при $r > R$

$$\psi(r, s) = f(s) \frac{1}{r} e^{i\sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} r} + f_1(s) \frac{1}{r} e^{-i\sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} r}. \quad (7.7)$$

При $\sigma > 0$ определим $\sqrt{2ms}$ как положительный корень на положительном луче вещественной оси в плоскости s ; для однозначности сделаем разрез на отрицательном луче вещественной оси ($\sigma=0, \eta < 0, s = \eta + i\sigma$). Очевидно, что при $\sigma > 0$ первый член в (7.7) при $r \rightarrow \infty$ по модулю экспоненциально убывает, а второй член экспоненциально возрастает. Но при $\sigma > 0$, когда $\psi(r, s)$ определяется сходящимся интегралом, $\psi(r, s)$ заведомо не растет при больших r . Поэтому полагаем $f_1(s) = 0$.

Другими словами, при определении $\psi(r, s)$ как образа решения нестационарного у. Ш., при естественных

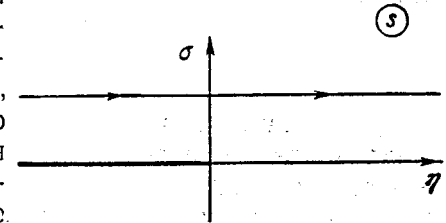


Рис. 34.

ограничениях начального состояния $\psi_0(r)$ получается, что на $\psi(r, s)$ наложено условие смыкания с расходящейся волной

$$\psi(r, s) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f(s) \frac{1}{r} e^{i \sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} r}.$$

Это условие первоначально получено для верхней полуплоскости s . Как уже указывалось, в нижней полуплоскости s функция $\psi(r, s)$ определяется не как интеграл, а как аналитическое продолжение $\psi(r, s)$, заданной в верхней полуплоскости. При этом необходимо сохранить и в нижней полуплоскости то же условие смыкания с первым членом в (7.7).

Интересующее нас распадное состояние удовлетворяет уравнению

$$-E\psi_E(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_E(r) + U(r)\psi_E(r) = 0 \quad (7.8)$$

и условию смыкания с расходящейся волной при определенном $E = E_0 - i\Gamma/2$. Следовательно, потенциал $U(r)$ таков, что уравнение (7.5) при $\hbar s = E$ имеет нетривиальное решение при равной нулю правой части.

Отсюда следует, что общее решение неоднородного уравнения (7.5) должно иметь полюс в точке $\hbar s = E$, т. е. в нижнем правом квадранте s . Решение должно иметь вид

$$\lim_{\hbar s \rightarrow E} \psi(r, s) = \frac{a\psi_E(r)}{\hbar s - E} + \psi_1(r, s), \quad (7.9)$$

где $\psi_1(r, s)$ конечно при $\hbar s = E$.

Задача заключается в определении коэффициента a . Для этого умножим (7.5) на $\psi_E(r)$, а (7.8) — на $\psi(r, s)$, вычтем одно из другого и проинтегрируем от 0 до R . Используя то обстоятельство, что вне потенциала при $\hbar s \rightarrow E$

$$\psi_E(r) = \frac{C}{r} e^{i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r}, \quad \psi(r, s) = f(s) \frac{1}{r} e^{i \sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} r},$$

$$f(s) = \frac{Ca}{\hbar s - E},$$

после несложных выкладок получим

$$(\hbar s - E) \left\{ \frac{iCf(s)}{\sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} + \right.$$

$$\left. + \int_0^\infty \left[\psi(r, s)\psi_E(r) - f(s) \frac{C}{r^2} e^{i \left(\sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \right) r} \right] r^2 dr \right\} =$$

$$= \int_0^\infty \psi_0(r)\psi_E(r)r^2 dr;$$

теперь подставляем

$$\psi(r, s) = \frac{a\psi_E(r)}{\hbar s - E} + \psi_1(r, s),$$

$$f(s) \frac{e^{i \sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} r}}{r} = \frac{aC}{\hbar s - E} \frac{1}{r} e^{i \sqrt{\frac{2ms}{\hbar}} r},$$

переходим к пределу $\hbar s \rightarrow E$ и распространяем интегралы до $R = \infty$, пользуясь тем, что подынтегральные выражения при $r > R$ равны нулю.

Получаем

$$a = \int_0^\infty \psi_0(r)\psi_E(r)r^2 dr \left\{ \int_0^\infty \left[\psi_E^2(r) - \left(\frac{C e^{i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r}}{r} \right)^2 \right] r^2 dr + \right.$$

$$\left. + \frac{iC^2}{2k} \right\} = \frac{\int_0^\infty (r\psi_0(r))(r\psi_E(r)) dr}{\int_0^\infty (r\psi_E(r))^2 dr}, \quad (7.10)$$

где интеграл $\int_0^\infty (r\psi_E)^2 dr = \int_0^\infty \chi_k^2 dr$ в знаменателе понимается в смысле формулы (6.7) предыдущего параграфа.

Подставляя выражение (7.9) в формулу обращения (7.4), получим вклад от обхода полюса $\hbar s = E$

$$\begin{aligned} \psi_p(r, t) &= a\psi_E(r) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \\ &= \psi_E(r) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \frac{\int_0^\infty (r\psi_0(r))(r\psi_E(r)) dr}{\int_0^\infty (r\psi_E(r))^2 dr}. \end{aligned} \quad (7.11)$$

В таком виде формула полностью подобна обычному выражению, которое мы получили бы в случае отрицательного вещественного собственного значения в дискретном спектре. Скалярное произведение $\int_0^\infty r^2 \psi_0 \psi_E dr$ и норма $\int_0^\infty \psi_E^2 r^2 dr$ в смысле (6.7) одинаково входят как в задачу теории возмущений, так и в нестационарную задачу.

§ 8. Рождение нестабильной частицы

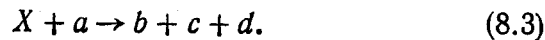
Пусть в результате реакции пара стабильных частиц может превращаться в пару других стабильных частиц:



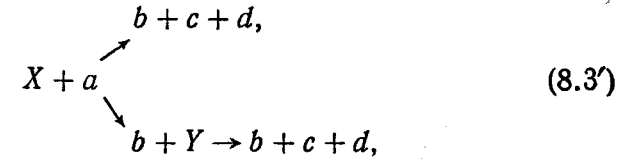
Что изменится в ходе этой реакции, если одна из конечных частиц, скажем, Y , является нестабильной и с течением времени распадается, т. е.



Прежде всего ясно, что при $r \rightarrow \infty$ частица Y никогда наблюдаться не будет; туда дойдут только продукты ее распада. Это означает, что формально мы имеем дело с трехчастичной реакцией



Ниже мы увидим, однако, что этот процесс можно представлять себе идущим по двум путям



т. е. с непосредственным образованием сразу трех частиц, и двухэтапным способом, когда сначала в реакции образуются $b + Y$, а потом уже Y распадается на $c + d$.

Физический процесс, в котором рождаются частицы, можно всегда представлять себе следующим образом. При столкновении начальных частиц образуется промежуточное состояние, в котором может происходить перестройка этих частиц. Радиус R промежуточного состояния (радиус реакции) обычно бывает порядка радиуса сил взаимодействия между частицами. Через какой-то отрезок времени промежуточное состояние распадается либо на исходные, либо на какие-то новые частицы. В первом случае мы имеем упругое или неупругое рассеяние, второй случай соответствует реакции. Таким образом, промежуточное состояние играет роль источника образующихся в реакции частиц. Поэтому процесс рождения частиц, скажем, в реакции (8.1) можно формально описать, рассматривая у. Ш. с источником:

$$(H_b + H_c + H_a + U_{cd} - E) \varphi = Q, \quad (8.4)$$

где H_b, H_c, H_a — гамильтонианы свободных частиц b, c и d , U_{cd} — потенциал взаимодействия между c и d , а Q — функция источника. Q , вообще говоря, зависит от полной энергии E , но в тех случаях, которые будут нас интересовать, этой зависимостью можно пренебречь.

В уравнении (8.4) мы для простоты пренебрегли взаимодействием частицы b с частицами c и d . Потенциал U_{cd} , однако, необходимо оставить, так как именно это взаимодействие обуславливает существование нестабильной частицы Y .

Сейчас мы выведем общие формулы для определения скорости различных реакций, описываемых уравне-

нием (8.3'). Чтобы охватить наиболее важные случаи, будем считать взаимодействие между c и d таким, что существует:

а) связанное состояние пары $c + d$ с энергией $-\varepsilon_0$ ($\varepsilon_0 > 0$); это состояние будем называть частицей Y_0 ;

б) квазистационарное состояние пары $c + d$ с энергией E_0 и шириной Γ (нестабильная частица Y).

Чтобы облегчить сравнение между процессами рождения стабильных и нестабильных частиц, положим спины Y_0 и Y одинаковыми и равными нулю. В зависимости от величины полной энергии E возможны разные процессы:

1) при $E < -\varepsilon_0$ обе реакции энергетически невозможны;

2) в случае $-\varepsilon_0 < E < 0$ возможна реакция с образованием Y_0 ;

3) если $0 < E < E_0$, то наряду с последней реакцией становится возможным образование всех трех частиц $b + c + d$ в свободном состоянии, но образование Y еще запрещено;

4) образование частицы Y энергетически возможно лишь при $E > E_0$.

Все эти случаи будут ниже рассмотрены по порядку.

В системе центра инерции y . III. имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\rho - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + U_{cd}(r) - E\right) \varphi = Q. \quad (8.5)$$

Здесь r — расстояние между c и d :

$$r = r_c - r_d,$$

ρ — расстояние между b и центром тяжести пары $(c+d)$:

$$\rho = r_b - \frac{m_c r_c + m_d r_d}{m_c + m_d},$$

а m и μ — соответствующие приведенные массы:

$$\mu = \frac{m_c m_d}{m_c + m_d}, \quad m = \frac{m_b (m_c + m_d)}{m_b + m_c + m_d}.$$

Пользуясь формулой (4.2) гл. IV для функции Грина, запишем φ как

$$\varphi(r, \rho) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_\varepsilon^{(+)}(r, r_1) G_{E-\varepsilon}^{(+)}(\rho, \rho_1) Q(r_1, \rho_1) dr_1 d\rho_1, \quad (8.6)$$

где G_ε и $G_{E-\varepsilon}$ — одночастичные функции Грина:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + U_{cd} - \varepsilon\right) G_\varepsilon^{(+)}(r, r_1) = \delta(r - r_1),$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\rho - (E - \varepsilon)\right) G_{E-\varepsilon}^{(+)}(\rho, \rho_1) = \delta(\rho - \rho_1).$$

Волновая функция $\varphi(r, \rho)$ зависит от двух координат. Однако ясно, что для определения полного числа актов рождения трех частиц $b + c + d$ достаточно найти поток только одной из частиц, скажем b . Чтобы сделать это, разложим $\varphi(r, \rho)$ по собственным состояниям пары $c + d$.

Полный набор волновых функций пары $c + d$ состоит из волновой функции связанного состояния (частица Y_0) $\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{r} \chi_0(r)$ и из нормированных на $\delta(k - k_1)$ волновых функций непрерывного спектра $\psi_k^{(+)}(r)$. Таким образом, разложение имеет вид

$$\varphi(r, \rho) = \Phi_0(\rho) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_0(r)}{r} + \int dk \psi_k^{(+)}(r) \Phi_k(\rho), \quad (8.7)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \Phi_0(\rho) &= \int \varphi(r, \rho) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{r} \chi_0^*(r) dr, \\ \Phi_k(\rho) &= \int \varphi(r, \rho) \psi_k^{(+)*}(r) dr. \end{aligned} \right\} \quad (8.7')$$

Левые части этих выражений можно рассматривать как волновые функции частицы b при условии, что пара $c + d$ образуется в связанном состоянии и в состоянии непрерывного спектра соответственно.

Пользуясь известными из четвертой главы свойствами функций Грина, а также формулой

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_1 G_{E-\varepsilon_1}^{(+)}(\rho, \rho_1) \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon + i\gamma} = -G_{E-\varepsilon}(\rho, \rho_1),$$

получаем из (8.6) — (8.7')

$$\Phi_0(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{iq_0\rho}}{\rho} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int dr_1 d\rho_1 Q(r_1, \rho_1) e^{iq_0 \frac{\rho\rho_1}{\rho}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_0^*(r_1)}{r_1} \equiv \frac{e^{iq_0\rho}}{\rho} f_0, \quad (8.8)$$

$$\Phi_k(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{iq\rho}}{\rho} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int dr_1 d\rho_1 Q(r_1, \rho_1) e^{iq \frac{\rho\rho_1}{\rho}} \Psi_k^{(+)*}(r_1) \equiv \frac{e^{iq\rho}}{\rho} f_k.$$

Здесь

$$q_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + \varepsilon_0)}, \quad q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - \varepsilon)}, \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu};$$

для перехода к асимптотике $\rho \rightarrow \infty$ использовалась формула (2.13) гл. IV.

В общем случае амплитуды f_0 и f_k зависят не только от E и ε , но и от направления вектора ρ . Будем считать радиус R источника достаточно малым, так что $qR \ll 1$. При этом экспоненту в подинтегральном выражении можно заменить единицей и зависимость от ρ/ρ пропадает. Функции Φ при этом становятся сферически-симметричными. Физически это соответствует тому, что частицы b образуются только в s -состоянии.

Полный выход реакции, в которой образуются частица b и связанное состояние Y_0 пары $c + d$, равен проинтегрированному по поверхности большой сферы потоку:

$$j_{Y_0} = \int \rho^2 d\Omega_\rho \frac{i\hbar}{2m} (\Phi_0 \nabla_\rho \Phi_0^* - \Phi_0^* \nabla_\rho \Phi_0) = 4\pi v_{q_0} |f_0|^2,$$

$$v_{q_0} = \frac{\hbar q_0}{m},$$

$d\Omega_\rho$ — элемент телесного угла в направлении вектора ρ .

Аналогично выход $j(k) dk$ реакции, в которой импульс относительного движения частиц $c + d$ находится в интервале dk вокруг k , есть

$$j(k) dk = 4\pi v_q |f_k|^2 dk, \quad v_q = \frac{\hbar q}{m}.$$

Проинтегрировав по всем направлениям вектора k и переходя от dk к $d\varepsilon$, получим

$$j(\varepsilon) d\varepsilon = \sum_{lm} j_{lm}(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$$j_{lm}(\varepsilon) = \frac{4\pi}{\hbar} \frac{v_q}{v} \left| \int dr_1 d\rho_1 Y_{lm} \left(\frac{r_1}{r_1} \right) \frac{1}{r_1} \chi_{lm}(r_1) Q(r_1, \rho_1) \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \right|^2. \quad (8.9)$$

Здесь $j_{lm}(\varepsilon)$ — это выход реакции при заданной энергии ε и числах l, m относительно движения частиц $c + d$.

Сравним выходы двухчастичной и трехчастичной реакций. Для оценки j_{Y_0} заметим, что радиус Y_0 порядка $\frac{1}{k_0} \equiv \left(\frac{\hbar^2}{2\mu\varepsilon_0} \right)^{1/2}$ и, следовательно, нормированная на единицу радиальная функция $\chi_0(r)$ по порядку величины равна $\left(\frac{2\mu\varepsilon_0}{\hbar^2} \right)^{1/4}$. Полный выход частиц Y_0 равен

$$j_{Y_0} = A_0 \sqrt{\varepsilon_0 (E + \varepsilon_0)};$$

$$A_0 = 2 \sqrt{\frac{\mu}{m} \frac{1}{\hbar}} \left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int dr_1 d\rho_1 \frac{Q(r_1, \rho_1)}{r_1} \right|^2. \quad (8.10)$$

Здесь A_0 от энергии не зависит.

Рассмотрим теперь выход трехчастичной реакции $X + a \rightarrow b + c + d$. Полную энергию E будем сначала считать меньшей, чем энергия E_0 квазистационарного состояния пары $c + d$ (частица Y), так что образование последней энергетически невозможно. Все три частицы b, c, d вылетают поэтому из источника Q независимо.

При малых энергиях весь выход будет определяться только членом $j_{00}(\varepsilon) d\varepsilon$ в (8.9). Это следует из того, что $\chi_{kl}(r_1) \sim (kr_1)^{l+1}$ и при $l > 0$ соответствующие члены дадут ничтожный вклад. Для оценки $j_{00}(\varepsilon) d\varepsilon$ заметим, что $\chi_{k0}(r_1)$ под знаком интеграла в (8.9) можно прибли-

женно заменить на kR (R — радиус источника Q). Получаем

$$j(\varepsilon) d\varepsilon = A_0 \sqrt{\varepsilon(E-\varepsilon)} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon_1}; \quad \varepsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}. \quad (8.11)$$

Здесь A_0 — та же самая постоянная, что и в (8.10), а ε_1 — постоянная размерности энергии. Численно она равна той энергии, которую имеет частица с массой μ , заключенная в объем радиуса R . В задачах ядерной физики $\varepsilon_1 \sim 1$ Мэв, в задачах физики элементарных частиц $\varepsilon_1 \sim 100$ Мэв.

Распределение частиц по энергиям в трехчастичной реакции дается формулой (8.11). Вид функции $j(\varepsilon)$ изображен кривой 1 на рис. 35. Полный выход трехчастичной реакции равен

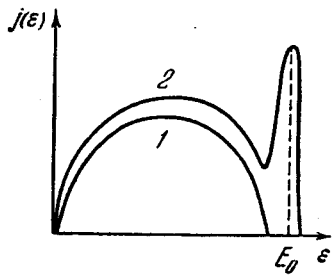


Рис. 35.

$$j = \int_0^E j(\varepsilon) d\varepsilon = A_0 \frac{\pi}{16\varepsilon_1} E^2. \quad (8.11')$$

Будем теперь увеличивать энергию E до тех пор, пока она не станет сравнимой с E_0 и, следовательно, станет энер-

гетически возможным образование нестабильной частицы Y . Рассмотрим $j_{00}(\varepsilon)$ при $\varepsilon \approx E_0$. Величина радиальной волновой функции $\chi_{k_0}(r)$ вблизи резонанса сильно зависит от энергии и может достигать больших значений. Соответствующие формулы были получены выше (см. (2.6), (2.7)). Подставляя их в (8.9), получаем

$$j_{00}(\varepsilon) d\varepsilon = A_0 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\varepsilon_1}{E_0}\right)^{3/2} \frac{2E_0}{\Gamma} \frac{\Gamma^2/4}{(\varepsilon - E_0)^2 + \Gamma^2/4} \frac{\sqrt{\varepsilon(E-\varepsilon)}}{2\varepsilon_1} d\varepsilon. \quad (8.12)$$

Как мы видим из этой формулы, $j_{00}(\varepsilon)$ имеет резкий максимум при $\varepsilon \approx E_0$ (кривая 2 на рис. 35). Появление резонансного множителя приводит к резкому увеличению выхода реакции при $\varepsilon \approx E_0$. Физической причиной этого является то, что при $\varepsilon \approx E_0$ вместо независимых частиц c и d вылетает квазистационарная частица Y ,

так что реакция практически превращается в двухчастичную.

Ширина интервала $\Delta\varepsilon$ вокруг $\varepsilon = E_0$, внутри которого доминирующей является двухчастичная реакция,

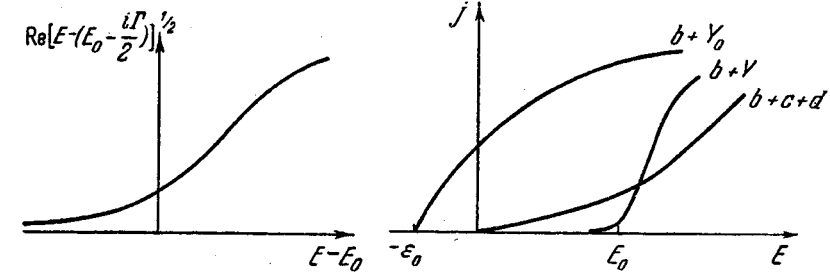


Рис. 36.

Рис. 37.

определяется условием (считаем для простоты, что $\varepsilon_1 \approx E_0$)

$$\frac{2E_0}{\Gamma} \frac{\Gamma^2/4}{(\Delta\varepsilon)^2 + \Gamma^2/4} = 1, \quad \text{т. е. } \Delta\varepsilon = \sqrt{\frac{E_0\Gamma}{2}} = \sqrt{\frac{E_0}{2\Gamma}} \Gamma.$$

Вычислим полный выход j_Y частиц Y при энергии E , близкой к E_0 . Для этого надо проинтегрировать (8.12) по ε по «двухчастичной» области $E_0 - \Delta\varepsilon \leq \varepsilon \leq E$:

$$j_Y = \int_{E_0 - \Delta\varepsilon}^E d\varepsilon j_{00}(\varepsilon) \approx A_0 \sqrt{\varepsilon_1} \operatorname{Re} \left[E - \left(E_0 - \frac{i\Gamma}{2} \right) \right]^{1/2}. \quad (8.13)$$

Энергетическая зависимость выхода определяется множителем, полученным впервые в работе А. И. Базя (1961):

$$\operatorname{Re} \left[E - \left(E_0 - \frac{i\Gamma}{2} \right) \right]^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{(E-E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + (E-E_0) \right]^{1/2} \approx \begin{cases} (E-E_0)^{1/2} \left[1 + \left(\frac{\Gamma}{4(E-E_0)} \right)^2 + \dots \right] & \text{для } E \gg E_0 + \frac{\Gamma}{2}, \\ \frac{\Gamma}{4(E_0-E)^{1/2}} & \text{для } E \ll E_0 - \frac{\Gamma}{2}. \end{cases}$$

График этой кривой изображен на рис. 36.

Итак, мы приходим к следующей общей картине. Начиная с энергии $E = -\varepsilon_0$ возможно образование

стабильной частицы Y_0 . Выход реакции $b + Y_0$ дается формулой (8.10). Зависимость выхода от энергии изображена на рис. 37. Начиная с $E = 0$ становится возможной трехчастичная реакция (формула (8.11)). При малых E ее выход очень мал ($\sim E^2$). Наконец, при $E \geq E_0$ начинается образование нестабильной частицы Y .

§ 9. Переход от квазистационарных состояний к стационарным

Показательно, что энергетическая зависимость выхода Y оказывается очень близкой к энергетической зависимости выхода чисто двухчастичной реакции с образованием Y_0 . При $\Gamma \rightarrow 0$ сходство оказывается практически полным. Существенно, что абсолютные выходы оказываются также близкими. Чтобы исключить влияние кинематических факторов (фазовый объем конечного состояния), следует сравнить выходы на одинаковом расстоянии от соответствующих порогов. При этом получаем

$$\frac{\text{выход } (b + Y)}{\text{выход } (b + Y_0)} = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}} \sim 1.$$

Аналогия между квазистационарными и стационарными состояниями велика, хотя на первый взгляд они имеют существенно различный характер: стационарные состояния составляют дискретный спектр, в то время как квазистационарные лежат в непрерывном спектре; волновые функции первых локализованы в определенной области пространства, тогда как у вторых они «размазаны» по всему пространству. В пределе $\Gamma \rightarrow 0$, однако, квазистационарное состояние должно переходить в стационарное. Физически это очевидно. Сейчас мы попытаемся понять и формальную сторону дела.

О наиболее характерной особенности волновых функций, описывающих квазистационарные состояния, мы уже упоминали раньше; это — очень большая величина функции в области потенциала (см. (2.7)):

$$\int_0^R \chi_k^2(r) dr = \frac{\hbar}{\pi} \frac{v_0 \Gamma / 2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2 / 4}. \quad (9.1)$$

Например, у радия радиус $R \sim 10^{-12}$ см, энергия распада $E_0 \sim 10 \text{ Мэв} \approx 10^{-5} \text{ эрг}$, а время жизни $T_{1/2} \approx 5000$ лет (т. е. $\Gamma \sim 10^{-38} \text{ эрг}$). При $E = E_0$ эта формула дает

$$\int_0^R \chi_k^2 dr \approx 10^{19} \text{ см.}$$

Насколько велика эта цифра, видно хотя бы из того, что в интеграл от квадрата модуля α -частичной волновой функции по большому объему радиусом в 10 световых лет

$$\int_0^{10 \text{ световых лет}} \chi_k^2 dr$$

подавляющий вклад будет давать центральная область $r \leq 10^{-12}$ см. И лишь при интегрировании по сферическому объему с радиусом, большим чем 10^{15} км ~ 100 световых лет, начнет сказываться «внешняя» часть волновой функции, имеющая вид $\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta)$.

Так как при всяком интегрировании (пусть даже в бесконечных пределах) всегда имеются в виду гораздо меньшие радиусы (порядка межатомных, например), то ясно, что простирающимися до бесконечности «хвостами» волновой функции всегда можно пренебречь. В этом смысле волновая функция ядра радия, хотя она формально и принадлежит к непрерывному спектру и «занимает» все пространство, на самом деле локализована внутри объема 10^{-12} см.

Другим проявлением большой величины χ_k в области резонанса (или, что то же самое, большого времени жизни квазистационарного состояния) является вид энергетического спектра частиц $b + c + d$ при $E > E_0$. Формально $c + d$ могут иметь любую энергию в интервале $0 < \varepsilon < E$, но фактически, как мы видели в предыдущем параграфе (см. рис. 35), значительная доля частиц рождается почти с точно фиксированной энергией относительного движения $\varepsilon = E_0$.

Аналогию между свойствами квазистационарных и стационарных состояний можно сформулировать несколько более строго.

Возьмем какую-нибудь функцию $f(r)$, достаточно быстро убывающую с ростом r . Разложим ее по собственным функциям $\chi_k(r)$ у. Ш. с потенциалом, имеющим квазистационарный уровень (см. рис. 25) при $k = k_0$.

Коэффициенты разложения $C(k)$ находятся по формуле

$$C(k) = \int_0^{\infty} f(r') \chi_k(r') dr'. \quad (9.2)$$

Вклад интервала $0 < k < k_0$ в разложение есть

$$\int_0^{k_0} C(k) \chi_k(r) dk = \int_0^{k_0} \chi_k(r) \int_0^{\infty} \chi_k(r_1) f(r_1) dr_1 dk. \quad (9.3)$$

Основной вклад в этот интеграл дает область $k \approx k_0$ и $r < R$. В этой области можно написать (см. § 2)

$$\chi_k(r) \approx A(k) \chi_k^{(0)}(r), \quad (9.4)$$

где $\chi_k^{(0)}$ слабо зависит от энергии. Поэтому (9.3) можно переписать как

$$\begin{aligned} \chi_k^{(0)}(r) \int_0^{k_0} A^2(k) dk \int_0^{\infty} f(r_1) \chi_k^{(0)}(r_1) dr_1 = \\ = \chi_k^{(0)}(r) \int_0^{\infty} \chi_k^{(0)}(r_1) f(r_1) dr_1, \end{aligned} \quad (9.5)$$

где мы использовали явное выражение для $A(k)$ *):

$$\int_0^{k_0} A^2(k) dk \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar v}{\pi} \frac{(\Gamma/2) dk}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4} = \frac{1}{\pi} \int \frac{(\Gamma/2) dE}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4} = 1. \quad (9.6)$$

*) Как обычно, функция $\chi_k^{(0)}$ нормируется условием

$$\int_0^R |\chi_k^{(0)}|^2 dr = 1.$$

Так как $A^2(k)$ имеет острый максимум при $E = E_0$, то из формулы (9.6) следует, что приближенно

$$A^2(k) = \delta(k - k_0).$$

В этом приближении разложение произвольной функции

$$f(r) = \int_0^{\infty} C(k) \chi_k(r) dk = \chi_k^{(0)}(r) \int_0^{\infty} \chi_k^{(0)} f dr_1 + \int_{k_0}^{\infty} C(k) \chi_k dk \quad (9.7)$$

имеет такой вид, как будто непрерывный спектр начинается лишь с $k = k_0$, а в интервале $0 \leq k \leq k_0$ имеется только одно стационарное состояние $\chi_k^{(0)}(r)$. (Это, конечно, идеализация, связанная с приближенным характером формулы (9.4), но поправки тем меньше, чем меньше Γ и чем меньший радиус имеет функция $f(r)$.)

Именно то обстоятельство, что квазистационарные состояния входят в различные разложения типа (9.7) совершенно таким же образом, как и стационарные, является формальной причиной сходства этих двух типов состояний.

§ 10. Время соударения

Рассуждения предыдущих параграфов о времени жизни квазистационарных состояний носили интуитивный характер. Сейчас мы рассмотрим этот вопрос более строго. Решим для начала следующую задачу (А. И. Базь, 1964): пусть частица заданной энергии E рассеивается на потенциале V радиуса R . Каково среднее время $T(E, a)$, проводимое частицей внутри сферы с радиусом $r = a$; $a \geq R$?

Нам нужно придумать какой-то механизм, который работал бы как часы, отмеряя время, проводимое частицей внутри сферы $r = a$. Можно предложить следующий «часовой» механизм: пусть внутри сферы $r = a$ имеется слабое однородное магнитное поле H , направленное по оси z и равное нулю при $r > a$, а рассеиваемые частицы обладают магнитным моментом μ . Пусть, далее, рассеиваемые частицы поляризованы по оси x (это означает, что магнитные моменты падающих на рассеиватель частиц направлены по оси x). До тех пор, пока частица

находится вне сферы $r = a$, на магнитный момент не действуют никакие силы и его направление остается постоянным. Но как только частица попадет в область $r \leq a$, где есть магнитное поле, магнитный момент начнет прецессировать вокруг направления поля с частотой $\omega = \frac{2\mu H}{\hbar}$.

(Изменением энергии частицы из-за взаимодействия $-\mu H$ при достаточно малом H можно пренебречь.) Прецессия будет продолжаться до тех пор, пока частица не вылетит из сферы $r = a$. Если время пребывания частицы внутри сферы есть T , то за это время магнитный момент успеет повернуться на угол $\theta = T\omega$ в плоскости x, y . Таким образом, зная угол поворота магнитного момента рассеянных частиц, легко вычислить и среднее время, проводимое частицей внутри сферы $r = a$. Это время оказывается равным

$$T(E, a) = \frac{2}{v} \left\{ \frac{d\delta}{dk} + a - \frac{1}{2k} \sin 2(ka + \delta) \right\}. \quad (10.1)$$

Чтобы вывести эту формулу, вычислим угол поворота магнитного момента θ .

После введения магнитного поля у Ш. приобретает вид (для простоты рассматривается случай $l = 0$):

$$\hat{\chi}'' + (k^2 - V)\hat{\chi} = -\frac{2m}{\hbar^2} \mu H \hat{\chi} = -\frac{2m}{\hbar^2} \mu H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \hat{\chi}. \quad (10.2)$$

Член в правой части описывает взаимодействие $-\mu H$; так как, по предположению, H направлено по оси z и так как вектор μ обязан иметь вид $\mu = 2\mu s$, где s — вектор спина частицы*), взятый нами равным $1/2$, то

$$\mu H = 2\mu s_z H = \mu \sigma_z H = \mu H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где σ_z — матрица Паули. Так как спин частицы $s = 1/2$, то под волновой функцией $\hat{\chi}$ надо понимать столбец

$$\hat{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix},$$

*) Вектор спина s — это единственный псевдовектор, характеризующий покоящуюся частицу. Поэтому псевдовектор μ обязан быть пропорциональным s .

где χ_1 и χ_2 описывают состояния с проекцией спина на ось z , равной $+1/2$ и $-1/2$ соответственно.

Задачу будем решать с помощью теории возмущений. Волновая функция нулевого приближения $\hat{\chi}^{(0)}$, по условию, должна описывать состояние с μ , направленным по оси z . Эта функция равна

$$\hat{\chi}^{(0)} = \chi_k(r) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где $\chi_k(r)$ — решение уравнения (10.2) без правой части, имеющее асимптотический вид

$$\chi_k(r) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kr + \delta).$$

Решение уравнения (10.2) ищем в виде

$$\hat{\chi} = \hat{\chi}^{(0)} + \hat{\chi}^{(1)} \equiv \hat{\chi}^{(0)} + \begin{pmatrix} \chi_1^{(1)} \\ \chi_2^{(1)} \end{pmatrix}.$$

В первом приближении имеем

$$(\hat{\chi}^{(1)})'' + (k^2 - V)\hat{\chi}^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \mu H \hat{\chi}^{(0)}.$$

Расписывая это уравнение по компонентам, получаем

$$(\chi_1^{(1)})'' + (k^2 - V)\chi_1^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \mu H \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_k(r),$$

$$\chi_2^{(1)''} + (k^2 - V)\chi_2^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} \mu H \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_k(r).$$

Используя функцию Грина, запишем решение в виде

$$\begin{aligned} \chi_1^{(1)} &= -\chi_2^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \mu H \frac{1}{\sqrt{2}} \int G_k(r, r_1) \chi_k(r_1) dr_1 \sim \\ &\sim \frac{2m}{\hbar^2} \mu H \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k} e^{i(kr+\delta)} \int_0^a \chi_k^2(r_1) dr_1 \equiv \\ &\equiv \frac{\beta}{2\sqrt{\pi}} e^{i(kr+\delta)}, \quad \beta = \frac{2m}{\hbar^2} \mu H \frac{\pi}{k} \int_0^a \chi_k^2(r_1) dr_1. \end{aligned}$$

Собирая все выписанные выше формулы, получаем асимптотическое выражение решения уравнения (10.2):

$$\hat{\chi} = \hat{\chi}^{(0)} + \hat{\chi}^{(1)} \sim \sim \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i(kr+\delta)} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i\beta \\ 1-i\beta \end{pmatrix} e^{i(kr+\delta)} \right\}. \quad (10.3)$$

Первый член в фигурной скобке описывает падающие на силовой центр частицы, а второй член — рассеянные.

Вычислим угол поворота спина θ . Средние значения x - и y -компонент спина равны (при вычислении пренебрегаем членами $\sim \beta^2 \sim H^2$)

$$\bar{s}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i\beta \\ 1-i\beta \end{pmatrix}^+ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i\beta \\ 1-i\beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2},$$

$$\bar{s}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i\beta \\ 1-i\beta \end{pmatrix}^+ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i\beta \\ 1-i\beta \end{pmatrix} = -\beta.$$

Таким образом, абсолютная величина угла поворота равна $\theta = 2\beta$, и для времени жизни с помощью (3.18) гл. III нетрудно получить

$$T(E, a) = \frac{\theta}{\omega} = \frac{2\beta\hbar}{2\mu H} = \frac{2}{v} \left\{ \frac{d\delta}{dk} + a - \frac{1}{2k} \sin 2(ka + \delta) \right\},$$

что и требовалось доказать.

Вернемся теперь к квазистационарным состояниям. Подставляя в (10.1) формулу для фазы (2.4) и пренебрегая всеми членами, кроме основного, получаем

$$T(E) = \frac{\hbar\Gamma}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (10.4)$$

Этот результат подтверждает сделанные выше заключения о среднем времени жизни квазистационарного состояния и о зависимости этого времени от точного значения энергии частицы.

Формула (10.1), как следует из ее вывода, имеет смысл выражения для среднего времени \bar{T} , проводимого частицей внутри сферы $r = a$. Можно было бы думать поэтому, что само время T пребывания частицы в

области $r \leq a$ не является строго определенной величиной, а имеется какое-то распределение этих времен $W(T)$.

Нетрудно показать, однако (А. И. Базь, 1967), что это распределение имеет вид δ -функции: $W(T) \sim \delta(T - T)$. Это означает, что время T является фиксированной величиной при заданной энергии E !

Отметим тут же, что это нисколько не противоречит соотношению неопределенностей $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$. Действительно, рассматривая движение волновых пакетов, легко убедиться в том, что входящее сюда Δt — это неопределенность в точном значении момента соударения. К длительности соударения это никакого отношения не имеет.

§ 11. Типы долгоживущих состояний

Было бы неправильно думать, что резонансные состояния, которым была посвящена эта глава, исчерпывают все типы относительно долгоживущих состояний частицы, находящихся в непрерывном спектре. Существуют еще по крайней мере два типа состояний («виртуальный уровень» и «пороговое состояние»), времена жизни которых могут значительно превышать характерное пролетное время (А. И. Базь, 1967).

Прежде чем перейти к их рассмотрению, разберем случай свободной частицы, движущейся с орбитальным моментом $l = 0$ относительно начала координат. Согласно общей формуле (10.1) такая частица проводит внутри сферы радиуса R время

$$T_{\text{св}} = \frac{2}{v} \left\{ R - \frac{1}{2k} \sin 2kR \right\}. \quad (11.1)$$

Если $kR \gg 1$, т. е. $\lambda \ll R$, где λ — длина волны частицы, то вторым членом в скобке можно пренебречь по сравнению с первым, и мы получаем классический результат:

$$T_{\text{св}} = T_{\text{кл}} = \frac{2R}{v}.$$

Время пребывания T равно времени пролета частицы сквозь сферу, причем траектория проходит через центр сферы.

Положение меняется, если $kR \ll 1$. В этом случае длина волны λ сравнима с радиусом сферы или больше его. Согласно квантовой механике частица может иметь $l = 0$, не проходя в то же время через точку $r = 0$, а находясь от нее на расстоянии порядка λ . Поэтому время пребывания частицы внутри сферы $r = R$ должно быть меньше классического пролетного времени $T_{кл.}$. Действительно, из (11.1) следует, что при $kR \ll 1$

$$T_{св} = \frac{4}{3v} k^2 R^3 \xrightarrow{k \rightarrow 0} 0. \quad (11.1')$$

Предположим теперь, что частица движется в поле потенциала, в котором имеется виртуальный уровень (или реальный уровень) с малой энергией связи. В этом случае при-

менимы формулы § 3 гл. I и фаза рассеяния δ определяется из уравнения

$$k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{a}, \quad (11.2)$$

где постоянная a носит название длины рассеяния. При $a < 0$ имеется виртуальный уровень с энергией $\frac{\hbar^2}{2ma^2}$, а при $a > 0$ — реальный уровень с энергией связи $\frac{\hbar^2}{2ma^2}$. Находя фазу δ из (11.2) и подставляя ее в формулу для времени жизни (10.1), при малых kR получаем ($|a| \gg R$)

$$T_{\text{вирт}} = \frac{2R}{v} \frac{2a^2 k^2}{1 + a^2 k^2}.$$

Зависимость T от энергии частицы (точнее, от k) изображена на рис. 38. Видно, что время жизни $T_{\text{вирт}}$ имеет максимум при $k \sim \frac{1}{|a|}$, причем в области вблизи максимума оно совпадает с классическим пролетным временем. Это — результат притягивающего действия потенциала. Эффект притяжения становится особенно хорошо виден, если мы сравним $T_{\text{вирт}}$ с временем $T_{св}$ (11.1') пребыва-

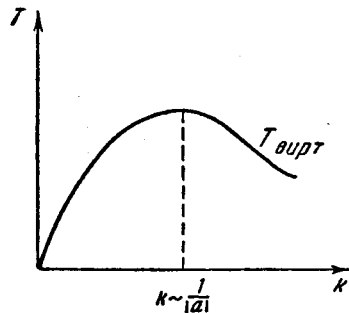


Рис. 38.

ния свободной частицы внутри сферы $r = R$. Отношение времен

$$\frac{T_{\text{вирт}}}{T_{св}} = 3 \left(\frac{a}{R} \right)^2 \frac{1}{1 + (ka)^2}$$

может достигать очень больших значений при $k \rightarrow 0$. Взяв $R = 2,5 \cdot 10^{-13}$ см, получаем, что в случае триплетного нейтрон-протонного взаимодействия ($a \approx 5,4 \cdot 10^{-13}$ см) отношение времен ≈ 12 ; для синглетного взаимодействия ($a = -20 \cdot 10^{-13}$ см) это отношение еще больше (≈ 200).

Таким образом, «виртуальный уровень» — не просто удобная математическая фикция, а вполне реальное физическое состояние системы, в котором частица проводит значительный промежуток времени в потенциальном поле.

Существует еще один широкий класс сравнительно долгоживущих состояний («пороговые состояния»). В главе IX будет показано, что если возможна какая-то реакция



то фаза δ упругого рассеяния ($X + a \rightarrow X + a$) при подходе к порогу реакции снизу ведет себя как

$$\delta \approx \delta_0 + \alpha \sqrt{E_{п} - E},$$

где δ_0 и α — некие постоянные, а $E_{п}$ — пороговая энергия. Производная фазы $\frac{d\delta}{dk}$ стремится к бесконечности при стремлении E к $E_{п}$. Поэтому время жизни неуклонно растет при приближении к точке порога снизу (рис. 39).

В принципе возможны и другие типы долгоживущих состояний, например состояния, отвечающие кратным полюсам S -матрицы (М. Гольдбергер, К. Ватсон, 1964В; Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев, 1965Б; Дж. Белл, К. Гельбел, 1965). Простой вывод формул, а также обсуждение закона распада для этого случая можно найти в работе И. Ю. Кобзарева и др. (1969).

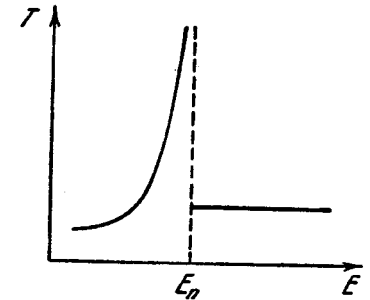


Рис. 39.

$r < R$. Это приводит к следующей картине. Во внешней области ($r > R$) наиболее общая волновая функция системы обязана иметь вид

$$\Psi = \sum_i (\alpha_i \psi_i^{(-)} - \beta_i \psi_i^{(+)}) \Phi_i; \quad \Phi_i = \Phi(a_i) \Phi(X_i), \quad (1.2)$$

где $\Phi(a_i)$ и $\Phi(X_i)$ — внутренние волновые функции частиц a_i и X_i (эти частицы, вообще говоря, могут быть составными), α_i и β_i — некие постоянные, $\psi_i^{(-)}$ и $\psi_i^{(+)}$ — два независимых решения у. Ш. для пары частиц $a_i + X_i$ в области $r > R$ (выше было предположено, что переходы между частицами происходят только во внутренней области; во внешней области между a_i и X_i действуют только дальнедействующие потенциалы кулоновского или центробежного типа и движение частиц в них описывается обычным у. Ш.). Для простоты будем считать частицы бесспиновыми и рассматривать состояние с заданным l . Волновые функции $\psi_i^{(\pm)}$ везде в дальнейшем нормируем условиями (рассматривается лишь радиальная часть)

$$\left. \begin{aligned} \psi_{r_i \rightarrow \infty}^{(\pm)} &\sim \frac{1}{\sqrt{v_i}} \frac{1}{r_i} e^{\pm i(k_i r_i - \frac{l\pi}{2})} && \left. \begin{array}{l} \text{— частицы не} \\ \text{заряжены,} \end{array} \right\} \\ \psi_{r_i \rightarrow \infty}^{(\pm)} &\sim \frac{1}{\sqrt{v_i}} \frac{1}{r_i} e^{\pm i(k_i r_i - \frac{l\pi}{2} + \eta_l + \alpha \ln 2k_i r_i)} && \left. \begin{array}{l} \text{— частицы} \\ \text{заряжены.} \end{array} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (1.3)$$

Здесь v_i — относительная скорость, k_i — волновой вектор, r_i — расстояние между a_i и X_i . Такая нормировка отвечает единичному потоку через поверхность большой сферы.

Какой вид имеет волновая функция при различных энергиях? Ответить на это можно, исходя из физического требования конечности ψ . Рассмотрим область энергий $M_2 c^2 > E > M_1 c^2$ (интервал I на рис. 40). Если условиться взять за нуль отсчета энергии величину $M_1 c^2$ и обозначить через $Q_i = (M_i - M_1) c^2$ разность энергий

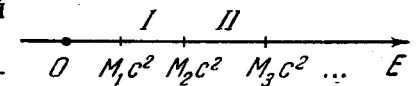


Рис. 40.

ГЛАВА VIII

ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА МНОГОКАНАЛЬНЫХ СИСТЕМ

§ 1. Волновая функция многоканальной системы

До сих пор мы рассматривали свойства частицы в потенциальном поле. Единственный физический процесс, который может происходить в этом случае, это упругое рассеяние. Как известно, к рассеянию частицы на потенциале сводится любая задача соударения двух частиц, взаимодействие которых описывается потенциалом $U(r_1 - r_2)$.

Наряду с этим простейшим случаем задачи рассеяния очень часто возникает необходимость рассматривать процесс перехода одних частиц в другие (реакции). Рассмотрим, например, следующую ситуацию. Пусть имеется N пар частиц $a_i + X_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$) способных, если это разрешается законом сохранения энергии, переходить друг в друга:



Суммарные массы частиц обозначим через $M_i = m_{a_i} + m_{X_i}$ и будем считать, что $M_1 < M_2 < \dots < M_N$. Во всех физически интересных случаях взаимодействие между частицами короткодействующее, т. е. им можно пренебречь при $r > R$, где R — радиус взаимодействия*). Соответственно этому везде ниже будем предполагать, что переходы (1.1) происходят только внутри объема

*) Здесь имеется в виду та часть взаимодействия, которая приводит к переходу одних частиц в другие. Дальнедействующее кулоновское взаимодействие между парой начальных или конечных частиц, например, в задачах ядерной физики, к реакциям, как правило, не приводит.

покоя 1-й и i -й пар частиц, то входящие в (1.3) волновые векторы i -х пар равны

$$k_i = \sqrt{\frac{(E - Q_i) 2m_i}{\hbar^2}}, \quad m_i = \frac{m_{a_i} m_{X_i}}{M_i}. \quad (1.4)$$

В интервале $I (E < Q_2)$ все k_j мнимы: $k_j = i |k_j|$, кроме k_1 , который действителен. Поэтому все функции $\psi_j^{(-)}$ с $j > 1$ на бесконечности экспоненциально возрастают, $\psi_j^{(+)} (j > 1)$ экспоненциально затухают, а функции $\psi_1^{(\pm)}$ конечны везде при $r > R$.

Таким образом, условие конечности волновой функции на бесконечности можно обеспечить, лишь если положить

$$\alpha_i = 0 \quad (i > 1). \quad (1.5)$$

При этом Ψ при $r > R$ обязана иметь вид

$$\Psi = (\alpha_1 \psi_1^{(-)} - \beta_1 \psi_1^{(+)}) \Phi_1 - \sum_{i=2}^N \beta_i \psi_i^{(+)} \Phi_i, \quad (1.6)$$

т. е. она содержит расходящуюся и сходящуюся волны частиц $a_1 + X_1$ (первый член), и сумму \sum , описывающую экспоненциально затухающие функции остальных каналов. Физически это соответствует тому, что при $E < Q_2$ уйти на бесконечность могут лишь частицы a_1 и X_1 , тогда как все остальные пары $a_i + X_i (i > 1)$ при этом значении энергии существовать в свободном состоянии не могут из-за нехватки энергии; они могут лишь виртуально образовываться во внутренней области и немного «вылезать» во внешнюю область (это «вылезание» и описывается экспоненциально затухающими «хвостами» во втором члене (1.6)).

Таким образом, единственный физический процесс, который может происходить в интервале энергий $E < Q_2$ — это упругое рассеяние частиц a_1 и X_1 . Во всякой теории волновая функция упругого рассеяния должна полностью определяться заданием амплитуды падающей волны — в нашем случае коэффициента α_1 . Разделим (1.6) на α_1 и запишем результат как

$$\Psi_1 = \psi_1^{(-)} \Phi_1 - \sum_{i=1}^N S_{i1} \psi_i^{(+)} \Phi_i. \quad (1.7)$$

Здесь величины $S_{i1} \equiv \beta_i / \alpha_1$ определяются уже целиком гамильтонианом рассматриваемой нами многоканальной системы. Они, конечно, являются функциями энергии. Определить их можно, лишь если известна волновая функция во внутренней области; сшивая ее и ее производные при $r = R$ с (1.7), мы получим уравнения для определения S_{i1} .

Закон сохранения числа частиц говорит, что амплитуды падающего и расходящегося потоков должны быть равны. Это сразу дает уже знакомое нам равенство

$$|S_{11}| = 1 \quad \text{при } 0 < E < Q_2.$$

Остальные коэффициенты S_{i1} могут быть любыми в пределах определенных неравенств (А. И. Базь, 1966).

Повысим теперь энергию и рассмотрим интервал $Q_2 < E < Q_3$ (интервал II на рис. 40). В этом интервале расходятся на бесконечности $\psi_i^{(-)}$ с $i > 2$, а функции $\psi_1^{(\pm)}$, $\psi_2^{(\pm)}$ и $\psi_{i>2}^{(+)}$ всюду конечны при $r > R$. Поэтому условия конечности волновой функции на бесконечности приводят теперь вместо (1.5) к условию

$$\alpha_i = 0 \quad \text{при } i > 2. \quad (1.8)$$

Амплитуды сходящихся волн двух первых каналов α_1 и α_2 мы можем выбирать произвольным образом. Одно независимое решение мы получим, взяв, например, $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 0$. Второе решение можно задать условием $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 1$. Физически ясно, чему соответствуют эти решения. Первое (оно совпадает по виду с (1.7)) отвечает такой постановке опыта, когда сталкиваются частицы a_1 и X_1 (сходящаяся волна имеется только в этом канале); в результате их соударения может произойти упругое рассеяние, описываемое амплитудой S_{11} , или реакция $a_1 + X_1 \rightarrow a_2 + X_2$, описываемая амплитудой S_{21} в (1.7). Другие частицы с $i > 2$, хотя и могут образовываться во внутренней области, но на бесконечность расходятся не могут из-за недостатка энергии (часто говорят, что такие каналы закрыты). Аналогично, решение с $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 1$

$$\Psi_2 = \psi_2^{(-)} \Phi_2 - \sum_{i=1}^N S_{i2} \psi_i^{(+)} \Phi_i \quad (1.7')$$

описывает физические процессы, происходящие при столкновении частиц a_2 и X_2 ; величины S_{i2} определяются взаимодействием между частицами во всем пространстве, включая внутреннюю область.

Мы приходим, таким образом, к выводу, что в интервале $Q_2 < E < Q_3$, где открыты два канала (т. е. где энергетически возможно существование двух пар частиц: $a_1 + X_1$ и $a_2 + X_2$), имеются две независимые и удовлетворяющие граничным условиям волновые функции нашей системы. Ясно, что независимых решений два и только два, так как если бы их было больше, то, добавляя их к Ψ_1 и Ψ_2 , мы получили бы, что существует несколько различных решений с одним и тем же значением амплитуд α_i перед волновыми функциями $\psi_i^{(-)}$. Это означало бы, что ход процесса не определяется амплитудами сходящихся волн, т. е., другими словами, что теория не позволяет однозначно описывать процессы соударения частиц, что она неполна. Во всякой физической теории число независимых решений, приемлемых с точки зрения граничных условий, в точности равно числу открытых каналов.

Теперь уже, действуя по аналогии, нетрудно сообразить, что при дальнейшем повышении энергии число независимых решений будет возрастать: в интервале $Q_3 < E < Q_4$ будут три независимые волновые функции, в качестве которых можно взять Ψ_1 , Ψ_2 и

$$\Psi_3 = \psi_3^{(-)}\Phi_3 - \sum_{i=1}^N S_{i3}\psi_i^{(+)}\Phi_i. \quad (1.9)$$

В интервале $Q_4 < E < Q_5$ будут четыре независимых решения и т. д. В общем случае в интервале $Q_m < E < Q_{m+1}$ имеется m независимых волновых функций, в качестве которых можно взять

$$\Psi_j = \psi_j^{(-)}\Phi_j - \sum_{i=1}^m S_{ij}\psi_i^{(+)}\Phi_i - \sum_{k=m+1}^N S_{kj}\psi_k^{(+)}\Phi_k \quad (j \leq m). \quad (1.10)$$

Первый член здесь описывает падающую волну частиц $a_j + X_j$, второй член — расходящиеся волны частиц

$a_i + X_i$ ($i \leq m$), образование которых энергетически возможно. Наконец, третий член описывает экспоненциально спадающие «хвосты» частиц $a_k + X_k$ ($k > m$), образующиеся виртуально во внутренней области, но неспособные уйти на бесконечность из-за недостатка энергии.

Величины S_{ij} — амплитуды функций $\psi_i^{(+)}$ — определяются взаимодействием между частицами. Наиболее важны амплитуды S_{ij} открытых каналов, так как через них, как мы увидим ниже, выражаются сечения рассеяний и реакций. Эти коэффициенты образуют так называемую матрицу рассеяния S_{ij} ($i, j \leq m$) (или S -матрицу). Она имеет m строк и m столбцов, и, следовательно, ее размерность в точности равна числу открытых каналов. С открытием каждого нового канала размерность S -матрицы возрастает на единицу. Наиболее общая волновая функция имеет вид (мы выписываем только ту ее часть, которая соответствует открытым каналам)

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_{j=1}^m \alpha_j \Psi_j = \sum_{j=1}^m \left\{ \alpha_j \psi_j^{(-)} \Phi_j - \alpha_j \sum_{i=1}^m S_{ij} \psi_i^{(+)} \Phi_i \right\} = \\ &= \sum_{j=1}^m \Phi_j \left\{ \alpha_j \psi_j^{(-)} - \psi_j^{(+)} \sum_{i=1}^m \alpha_i S_{ji} \right\}. \quad (1.11) \end{aligned}$$

Вместо того чтобы писать внутренние волновые функции Φ_i частиц каналов, можно условиться записывать Ψ в виде столбца из m чисел:

$$\Psi = \begin{bmatrix} \alpha_1 \psi_1^{(-)} - \sum_j S_{1j} \alpha_j \psi_j^{(+)} \\ \alpha_2 \psi_2^{(-)} - \sum_j S_{2j} \alpha_j \psi_j^{(+)} \\ \vdots \\ \alpha_m \psi_m^{(-)} - \sum_j S_{mj} \alpha_j \psi_j^{(+)} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \alpha_1 \psi_1^{(-)} - \beta_1 \psi_1^{(+)} \\ \alpha_2 \psi_2^{(-)} - \beta_2 \psi_2^{(+)} \\ \vdots \\ \alpha_m \psi_m^{(-)} - \beta_m \psi_m^{(+)} \end{bmatrix}, \quad (1.12)$$

где член в первой строке — это волновая функция частиц первого канала, член во второй строке описывает движение частиц во втором канале и т. д. Вводя квадратные

$m \times m$ -матрицы

$$\hat{\psi}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} \psi_1^{(\pm)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \psi_2^{(\pm)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \psi_m^{(\pm)} \end{pmatrix}; \quad \hat{S} = \begin{pmatrix} S_{11} S_{12} & \dots & S_{1m} \\ S_{21} S_{22} & \dots & S_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ S_{m1} S_{m2} & \dots & S_{mm} \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

и столбцы коэффициентов перед расходящимися и сходящимися волнами

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix}; \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

можем записать матрицу (1.12) в следующем виде:

$$\hat{\Psi} = (\hat{\psi}^{(-)} \hat{\alpha} - \hat{\psi}^{(+)} \hat{\beta}); \quad \hat{\beta} = \hat{S} \hat{\alpha}. \quad (1.15)$$

Связь между матрицами $\hat{\alpha}$ и $\hat{\beta}$, описывающими амплитуды сходящихся и расходящихся волн, целиком определяется S -матрицей, которая, таким образом, содержит в себе всю информацию о свойствах взаимодействия нашей системы. Точнее говоря, дело обстоит следующим образом. В случае потенциального рассеяния частицы S -матрица вырождается в совокупность чисел $S_l = e^{2i\delta_l(k)}$. В этом случае доказано (И. М. Гельфанд, Б. М. Левитан, 1951), что значения всех фаз рассеяния $\delta_l(k)$ во всем интервале энергий $0 < k < \infty$ позволяют полностью определить потенциал, т. е. действительно величины $S_l(k)$ содержат в себе всю информацию о свойствах системы.

В случае многоканальных систем, однако, аналогичной теоремы, хотя она и кажется самоочевидной, никто еще доказать не смог. Нужно подчеркнуть, кроме того, что фактическое восстановление гамильтониана системы по данным рассеяния представляет очень большие трудности, связанные отчасти с чисто математическими сложностями, а отчасти с необходимостью знать все элементы S -матрицы при всех энергиях. Извлечение этих данных

из опыта — так называемый фазовый анализ — сопряжено с необходимостью проводить очень тонкие эксперименты.

Сделаем еще одно замечание. Из общего выражения (1.2) следует, что при $r > R$ имеется всего $2N$ независимых решений соответственно $2N$ постоянным α_i и β_i . Каждое из этих $2N$ независимых решений можно продолжить во внутреннюю область. Рассмотрим интервал $Q_1 < E < Q_2$. В нем, как мы знаем, имеется лишь одно физически приемлемое решение. Условия на бесконечности накладывают $(N-1)$ условие (1.5). Одну постоянную α_1 мы можем выбрать произвольной, так как она соответствует нормировке волновой функции. Остаются N условий. Это — условия, накладываемые на волновую функцию во внутренней области. Таким образом, число граничных условий во внутренней области равно полному числу каналов: в случае одного канала этим условием является конечность волновой функции при $r = 0$. В случае N каналов волновые функции всех каналов должны быть регулярны. Отсюда — N условий во внутренней области.

§ 2. Сечения. Унитарность S -матрицы

Формальный аппарат S -матрицы очень полно рассмотрен в работе А. Лейна и Р. Томаса (1958). Поэтому мы ниже ограничимся простейшим случаем бесспиновых частиц.

Пусть энергия заключена в интервале $Q_m < E < Q_{m+1}$ и мы рассматриваем процессы, происходящие при столкновении частиц a_j и X_j . Паре частиц $a_j + X_j$ в волновой функции этого процесса отвечает член

$$\psi_j^{(-)} - S_{jj} \psi_j^{(+)} \equiv (\psi_j^{(-)} - \psi_j^{(+)}) - (S_{jj} - 1) \psi_j^{(+)} \quad (2.1)$$

(в матричной записи этот член находится в j -й строке). (Совершенно аналогично тому, как это делалось во второй главе, мы выделили в первую скобку функцию свободного движения.) Амплитуда рассеянной волны равна $S_{jj} - 1$, а сечение рассеяния

$$\sigma_{jj} = \frac{\pi}{k_j^2} (2l + 1) |S_{jj} - 1|^2, \quad (2.2)$$

где множитель $\frac{\pi}{k_j^2}(2l+1)$ возникает благодаря тому, что нормированная на поток $1 \frac{\text{частица}}{\text{сек} \cdot \text{см}^2}$ плоская волна

$$\frac{1}{V_{\sigma_j}} e^{ik_j r_j}$$

содержит сходящуюся волну $\psi_j^{(-)} Y_{lm}(\theta, \varphi)$ с амплитудой

$$\frac{(-1)}{k_j} i^{l-1} \sqrt{\pi(2l+1)}, \quad (2.3)$$

и, значит, расходящийся поток равен

$$\begin{aligned} \sigma_{jj} &= \left| \frac{(-1)}{k_j} i^{l-1} \sqrt{\pi(2l+1)} (S_{jj} - 1) \right|^2 = \\ &= \frac{\pi}{k_j^2} (2l+1) |S_{jj} - 1|^2. \end{aligned}$$

Полученная формула для сечения рассеяния имеет тот же вид, что и в случае потенциального рассеяния. Единственное отличие — это то, что в случае многоканальных систем матричные элементы $|S_{jj}| \leq 1$ и, следовательно, фазы рассеяния комплексны.

Вычислим теперь сечение σ_{ji} реакций $X_j(a_j, a_i) X_i$ ($i \neq j$). При единичном $\left(1 \frac{\text{частица}}{\text{сек} \cdot \text{см}^2}\right)$ потоке сталкивающихся частиц поток расходящихся частиц $a_i + X_i$ через сферу большого радиуса, по определению, совпадает с сечением рождения этих частиц и равен

$$\sigma_{ji} = \left| \frac{1}{k_j} i^{l-1} \sqrt{\pi(2l+1)} S_{ji} \right|^2 = \frac{\pi}{k_j^2} (2l+1) |S_{ji}|^2. \quad (2.4)$$

Формулы (2.2) и (2.4) можно объединить, записав сечение процесса $X_j(a_j, a_i) X_i$ как

$$\sigma_{ji} = \frac{\pi}{k_j^2} (2l+1) |S_{ji} - \delta_{ji}|^2, \quad (2.5)$$

где δ_{ji} — символ Кронекера.

Полученные выше формулы показывают, что сечения всех процессов выражаются через элементы S -матрицы.

Изучение общих свойств S -матрицы является поэтому важнейшей задачей. Сейчас мы ею и займемся.

Прежде всего покажем, что элементы S -матрицы не независимы, а подчиняются определенным ограничениям. Из физических соображений ясно, что в любом физическом процессе общее число частиц должно сохраняться. Другими словами, какую бы суперпозицию волновых функций

$$\Psi = \sum \alpha_j \Psi_j \quad (2.6)$$

мы ни взяли, сумма потоков частиц, сходящихся к началу координат, должна равняться сумме потоков расходящихся частиц.

Полный сходящийся поток, согласно (1.11), (1.12), равен

$$I^{(-)} = \sum_{j=1}^m |\alpha_j|^2,$$

а полный расходящийся поток (см. (1.11))

$$I^{(+)} = \sum_{i=1}^m \left| \sum_j S_{ij} \alpha_j \right|^2 = \sum_{ijk} S_{ij} \alpha_j S_{ik}^* \alpha_k^*.$$

Эти потоки должны совпадать при любом значении постоянных α_i . Приравнявая выражения, стоящие в $I^{(-)}$ и в $I^{(+)}$ при одних и тех же произведениях $\alpha_i \alpha_j^*$, получаем условия, налагаемые на S -матрицу:

$$\sum_{i=1}^m S_{ij} S_{ik}^* = \delta_{jk}. \quad (2.7)$$

Матрица, составленная из элементов S_{ij} , удовлетворяющих (2.7), называется унитарной.

Таким образом, закон сохранения числа частиц приводит к унитарности S -матрицы. Записанное в матричной форме, это условие имеет вид

$$\hat{S}^+ \hat{S} = 1, \text{ т. е. } S^+ = \hat{S}^{-1}, \quad (2.8)$$

где \hat{S}^+ обозначает матрицу, получаемую из \hat{S} транспони-

рованием и комплексным сопряжением. В простейшем случае одноканальной системы (2.8) вырождается в хорошо известное нам условие

$$S^*S = 1.$$

§ 3. Обратимость времени. Симметрия S-матрицы

Законы классической механики допускают обращение времени. Под этим понимают следующее. Пусть имеется система из N частиц и их движение описывается координатами и скоростями

$$\mathbf{x}_i(t); \mathbf{v}_i(t). \quad (3.1)$$

В какой-то момент времени $t = T$ остановим все частицы и пустим их в обратном направлении со скоростями

$$-\mathbf{v}_i(T).$$

Если так сделать, то система частиц начнет проходить в обратной последовательности все этапы своего предыдущего развития, т. е. координаты и скорости при $t > T$ будут равны

$$\mathbf{x}'_i(T + \tau) = \mathbf{x}_i(T - \tau); \quad \mathbf{v}'_i(T + \tau) = -\mathbf{v}_i(T - \tau). \quad (3.2)$$

Для доказательства достаточно рассмотреть уравнения движения. Они имеют вид

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (3.3)$$

где F — силы между частицами. При этом мы рассматриваем простейший случай, когда силы зависят лишь от взаимного расположения частиц. Если (3.1) является решением этих уравнений, то прямой подстановкой убеждаемся в том, что функции

$$\mathbf{v}'_i(t) \equiv -\mathbf{v}_i(-t); \quad \mathbf{x}'_i(t) = \mathbf{x}_i(-t) \quad (3.4)$$

также являются решениями уравнений движения (3.3). Это и доказывает обратимость времени в классической механике.

В квантовой механике вопрос об обратимости времени ставится следующим образом (Е. Вигнер, 1932). Волновая функция $\psi(x, t)$ развивающегося во времени процесса должна находиться из уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t), \quad (3.5)$$

где через x обозначена совокупность координат рассматриваемой системы. В момент времени t плотность вероятности и средний импульс равны

$$\left. \begin{aligned} w(x, t) &= |\psi(x, t)|^2, \\ p(t) &= \int \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) dx. \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

Принцип обратимости времени говорит, что наряду с процессом, описываемым функцией $\psi(x, t)$, обязан существовать и обратный процесс с волновой функцией $\psi_{об}(x, t)$ такой, что

$$w_{об}(x, t) = w(x, -t), \quad p_{об}(t) = -p(-t). \quad (3.7)$$

Найдем вид $\psi_{об}$. Заменим t на $-t$ в (3.5) и затем перейдем к комплексно сопряженному уравнению. В результате такой комбинированной операции (3.5) переходит в

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, -t)}{\partial t} = H^* \psi^*(x, -t), \quad (3.8)$$

и мы видим, что если $H^* = H$, то

$$\psi_{об}(x, t) = \psi^*(x, -t) \quad (3.9)$$

является решением исходного у.Ш. (3.5). Это новое решение описывает обратный процесс. Действительно,

$$\left. \begin{aligned} w_{об}(x, t) &= |\psi^*(x, -t)|^2 = w(x, -t), \\ p_{об}(t) &= \int \psi(x, -t) \hat{p} \psi^*(x, -t) dx = \\ &= - \left[\int \psi^*(x, -t) \hat{p} \psi(x, -t) dx \right]^* = -p(-t). \end{aligned} \right\} \quad (3.10)$$

Здесь мы использовали то, что, согласно определению оператора импульса, $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$; $\hat{p}^* = -\hat{p}$, а среднее значение $p(t)$ действительно.

Таким образом, каждому процессу $\psi(x, t)$ можно сопоставить обратный процесс с волновой функцией $\psi_{об}(x, t)$. Необходимым условием существования обратных процессов является действительность гамильтониана

$$\hat{H}^* = \hat{H}. \quad (3.11)$$

Для системы из N бесспиновых частиц, между которыми действуют обычные потенциальные силы, это условие выполняется всегда, так как полный гамильтониан

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \sum_{i < k} V_{ik}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)$$

действителен.

Некоторые осложнения возникают в случае заряженных частиц в магнитном поле. В качестве оператора кинетической энергии теперь надо писать

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2,$$

где \mathbf{A} — вектор-потенциал поля, на который наложено обычное условие $\text{div } \mathbf{A} = 0$. Для \hat{T} имеем

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + i \frac{e\hbar}{mc} (\mathbf{A}\nabla) + \frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2.$$

Видно, что, в отличие от случая электрического поля, при обращении направления движения частиц мы должны одновременно изменить знак магнитного поля или, что эквивалентно, знак векторного потенциала. Поэтому операция обращения времени должна содержать комплексное сопряжение и изменение знака \mathbf{A} (или поля \mathbf{H}). Как видно из вида \hat{T} , гамильтониан при такой операции остается инвариантным:

$$\hat{T}(\mathbf{A}) = \hat{T}^*(-\mathbf{A}). \quad (3.11')$$

Для волновой функции $\psi_{об}(t)$, описывающей обращенный во времени процесс, как и раньше, получаем

$$\psi_{об}(t) = \psi^*(-t).$$

Дальнейшие осложнения возникают при рассмотрении частиц со спином. Пусть, например, спин частиц равен $1/2$. Тогда их волновая функция есть столбец

$$\psi(x, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, t) \\ \psi_2(x, t) \end{pmatrix},$$

где верхняя и нижняя компоненты описывают состояния с $s_z = 1/2$ и $s_z = -1/2$ соответственно. Средние значения различных компонент спина в точке x в момент t равны

$$s_x = \psi^+ \hat{s}_x \psi = \frac{1}{2} (\psi_1^* \psi_2^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\psi_1 \psi_2^* + \psi_1^* \psi_2),$$

$$s_y = \psi^+ \hat{s}_y \psi = \frac{i}{2} (\psi_1 \psi_2^* - \psi_1^* \psi_2),$$

$$s_z = \psi^+ \hat{s}_z \psi = \frac{1}{2} (|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2).$$

Отсюда мы видим, что переход к комплексно сопряженной функции

$$\psi(x, t) \rightarrow \psi^*(x, t)$$

приводит к состоянию с другим направлением спина:

$$s_x \rightarrow s_x, \quad s_y \rightarrow -s_y, \quad s_z \rightarrow s_z.$$

С другой стороны, при изменении направления движения частиц на обратное их момент количества движения должен изменить знак. Это — общее свойство любого момента количества движения, в частности спинового. Такому условию удовлетворяет функция

$$\psi_{об}(x, t) = \hat{\sigma}_y \psi^*(x, -t) = i \begin{pmatrix} -\psi_2^*(x, -t) \\ \psi_1^*(x, -t) \end{pmatrix}.$$

Для средних значений различных проекций спина в данном состоянии получим

$$s'_x(t) = -s_x(-t); \quad s'_y(t) = -s_y(-t); \quad s'_z(t) = -s_z(-t).$$

Кроме того, функция ψ удовлетворяет и другим условиям обратимости:

плотность вероятности найти частицу в точке x :

$$\omega_{об}(x, t) = (\psi_{об}(x, t))^+ \psi_{об}(x, t) = (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) \equiv \omega(x, -t);$$

среднее значение импульса:

$$\begin{aligned} p_{06}(t) &= \int dx \psi_{06}^+(x, t) \hat{p} \psi_{06}(x, t) = \\ &= \int dx [\psi_2(x, -t) \hat{p} \psi_2^*(x, -t) + \psi_1(x, -t) \hat{p} \psi_1^*(x, -t)] \equiv \\ &\equiv -p(-t). \end{aligned}$$

Таким образом, функция

$$\psi_{06}(x, t) = \hat{\sigma}_y \psi^*(x, -t)$$

по всем своим признакам должна описывать обращенный во времени процесс. Из уравнения для $\psi(x, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t)$$

находим уравнение для ψ_{06} :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{06}(x, t)}{\partial t} = \hat{\sigma}_y \hat{H}^* \hat{\sigma}_y \psi_{06}(x, t).$$

Поэтому, чтобы ψ_{06} было решением у. Ш., т. е. чтобы обратный процесс существовал, необходимо выполнение условия

$$\hat{H}(A) = \hat{\sigma}_y \hat{H}^*(-A) \hat{\sigma}_y \quad (3.11'')$$

(если имеется внешнее магнитное поле, то при комплексном сопряжении гамильтониана одновременно надо изменить и знак у поля).

Если в \hat{H} не входит оператор спина частиц, то $\hat{\sigma}_y$ и \hat{H} коммутируют; в этом случае условия обратимости времени сводятся снова к условиям (3.11), (3.11'). Если \hat{H} зависит от спина, то требуется дальнейшее исследование. Легко убедиться в том, что взаимодействия типа σH и σl , где H — магнитное поле, а l — оператор орбитального момента, удовлетворяют условию (3.11'').

Этому условию не удовлетворяют члены типа σE , где E — электрическое поле *).

*) Такие члены могут возникать только в теории с несохранением четности, поскольку E — полярный, а σ — аксиальный вектор, и потому σE меняет знак при инверсии.

Присутствие в гамильтониане таких членов означает, что у частицы имеется электрический дипольный момент $d \sim \sigma$. Таким образом, уже из обратимости времени, как впервые указал Л. Д. Ландау (1957), следует отсутствие электрического дипольного момента у стабильной частицы. Так и обстояло дело до 1964 г., пока не было никаких экспериментальных указаний (и теоретических соображений) в пользу того, что обратимость времени может в некоторых случаях нарушаться. Тем более неожиданным явилось открытие в 1964 г. в опытах по распаду K -мезонов слабого нарушения обращения времени (Дж. Кристенсон и др.). Из отсутствия точной инвариантности относительно обращения времени следует, что стабильная частица со спином (например, протон или электрон), вообще говоря, должна обладать небольшим электрическим дипольным моментом.

После этого небольшого отступления рассмотрим вопрос о том, к каким ограничениям на S -матрицу приводит обращение времени. Запишем обычное у. Ш.:

$$H\psi(x) = E\psi(x). \quad (3.12)$$

Так как гамильтониан действителен, то, переходя к комплексно сопряженному уравнению, получаем, что при действительной энергии $\psi^*(x)$ также является решением уравнения (3.12). (Имеются в виду бесспиновые незаряженные частицы.) Это следствие принципа обратимости времени позволяет установить важные свойства S -матрицы.

Можно рассуждать следующим образом. Асимптотический вид наиболее общей волновой функции многоканальной системы в матричных обозначениях можно записать как (см. (1.15))

$$\hat{\Psi} \sim [\hat{\Phi}^{(-)} - \hat{\Phi}^{(+)} \hat{S}]. \quad (3.13)$$

В силу обратимости времени комплексно сопряженная функция

$$\hat{\Psi}^* \sim [\hat{\Phi}^{(+)} - \hat{\Phi}^{(-)} \hat{S}^*] \quad (3.14)$$

также должна быть волновой функцией нашей системы, т. е. она с точностью до постоянного множителя должна совпадать с $\hat{\Psi}$. Другими словами, связь между

амплитудами сходящихся и расходящихся волн у $\hat{\Psi}^*$ должна быть в точности той же, что и у $\hat{\Psi}$. Умножив выражение в квадратных скобках в (3.14) справа на $(-\hat{S}^{-1})^*$, получим

$$\hat{\Psi}^* \sim [\bar{\psi}^{(-)} - \bar{\psi}^{(+)}(\hat{S}^{-1})^*]. \quad (3.13')$$

Связь между амплитудами будет той же, что и в (3.13), если $(\hat{S}^{-1})^* = \hat{S}$. С другой стороны, мы знаем из (2.8), что $\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+$. Поэтому, вспоминая определение матрицы \hat{S}^+ , окончательно получаем

$$(\hat{S}^{-1})^* = (\hat{S}^+)^* = \hat{S}_{\text{тр}} = \hat{S}, \quad (3.15)$$

где $\hat{S}_{\text{тр}}$ обозначает матрицу, получаемую из \hat{S} транспонированием, т. е. заменой $S_{ij} \rightarrow S_{ji}$. Так как, согласно (3.15), при такой замене \hat{S} -матрица не меняется, то это означает, что она симметрична (т. е. $S_{ij} = S_{ji}$) и, следовательно,

$$\hat{S}^+ = \hat{S}^* = \hat{S}^{-1}. \quad (3.16)$$

Таким образом, обратимость времени влечет за собой симметрию матрицы рассеяния.

В некоторых задачах асимптотику волновой функции удобно задавать не в виде суперпозиции сходящихся и расходящихся волн $\psi_i^{(\pm)}$, а в виде стоячих волн:

$$\left. \begin{aligned} \phi_i^{(1)} &= \frac{1}{2}(\psi_i^{(+)} + \psi_i^{(-)}) \sim \frac{1}{\sqrt{v_i}} \cos\left(k_i r - \frac{l\pi}{2}\right), \\ \phi_i^{(2)} &= \frac{1}{2i}(\psi_i^{(+)} - \psi_i^{(-)}) \sim \frac{1}{\sqrt{v_i}} \sin\left(k_i r - \frac{l\pi}{2}\right). \end{aligned} \right\} \quad (3.17)$$

Чтобы перейти от системы волновых функций (1.13) к системе функций типа стоячих волн, введем диагональные матрицы:

$$\hat{\phi}^{(1)} = \frac{1}{2}(\hat{\psi}^{(+)} + \hat{\psi}^{(-)}) \quad \text{и} \quad \hat{\phi}^{(2)} = \frac{1}{2i}(\hat{\psi}^{(+)} - \hat{\psi}^{(-)}). \quad (3.17')$$

Выразим теперь $\bar{\psi}^{(\pm)}$ через $\hat{\phi}^{(1)}$ и $\hat{\phi}^{(2)}$ и подставим полученные выражения в общую волновую функцию (1.15).

При этом получаем

$$\hat{\Psi} = [\hat{\phi}^{(1)}(1 - \hat{S}) - \hat{\phi}^{(2)}i(1 + \hat{S})] \hat{a} = [\hat{\phi}^{(1)} - \hat{\phi}^{(2)}\hat{K}] \hat{\psi}, \quad (3.18)$$

где через \hat{K} обозначена матрица

$$\hat{K} = i(1 + \hat{S})(1 - \hat{S})^{-1}, \quad (3.19)$$

а $\hat{\psi}$ — новая матрица произвольных коэффициентов, связанная с матрицей амплитуд \hat{a} перед сходящимися волнами соотношением

$$\hat{\psi} = (1 - \hat{S}) \hat{a}. \quad (3.20)$$

Введенная выше матрица \hat{K} называется обычно K -матрицей и в выбранном нами представлении стоячих волн играет роль \hat{S} -матрицы в представлении сходящихся и расходящихся волн. K -матрица обладает рядом важных свойств, вытекающих из унитарности и симметрии S -матрицы. Чтобы получить эти свойства, умножим (3.19) справа на $(1 - \hat{S})$ и применим эрмитово сопряжение к обеим частям полученного равенства. В результате получим

$$(1 - \hat{S}^+) \hat{K}^+ = (1 + \hat{S}^+)(-i). \quad (3.21)$$

Учитывая далее, что $\hat{S}^+ = \hat{S}^{-1}$, умножаем это равенство слева на \hat{S} и получаем

$$(-1 + \hat{S}) \hat{K}^+ = (1 + \hat{S})(-i),$$

т. е.

$$\hat{K}^+ = i(1 + \hat{S})(1 - \hat{S})^{-1} = \hat{K}. \quad (3.22)$$

Таким образом, матрица \hat{K} — эрмитова.

Учтем теперь симметрию S -матрицы, благодаря которой

$$\hat{S}^+ = \hat{S}^*. \quad (3.23)$$

Взяв комплексное сопряжение равенства (3.21), с помощью (3.22), (3.23) получаем

$$(1 - \hat{S}) \hat{K}^{**} = i(1 + \hat{S}),$$

т. е.

$$\hat{K}^* = \hat{K}^+ = \hat{K}. \quad (3.24)$$

Другими словами, K -матрица должна быть действительной и симметричной матрицей. Именно то, что условия сохранения числа частиц и обратимости времени принимают такой простой вид в представлении стоячих волн, и делает полезным это представление.

Всякая действительная симметричная $m \times m$ матрица имеет $\frac{m(m+1)}{2}$ независимых действительных матричных элементов. K -матрица определяется характером взаимодействия между частицами. Поэтому мы можем сказать, что вид волновой функции вне радиуса взаимодействия зависит от характера взаимодействия только через посредство $\frac{m(m+1)}{2}$ действительных параметров. Эти параметры, конечно, являются функциями энергии.

Если пользоваться представлением стоячих волн, то роль этих параметров играют $\frac{m(m+1)}{2}$ независимых матричных элементов K -матрицы. При переходе к представлению сходящихся и расходящихся волн число независимых параметров по-прежнему остается равным $\frac{m(m+1)}{2}$, так как S -матрица однозначно выражается через K -матрицу. Действительно, из (3.19) следует формула

$$\hat{S} = (i\hat{K} + 1)(i\hat{K} - 1)^{-1}. \quad (3.25)$$

Упомянем, наконец, что существуют еще ограничения на энергетическую зависимость элементов S -матрицы (А. И. Базь, 1966). Мы не будем, однако, выписывать соответствующих формул, так как, по-видимому, пока нет задач, где они могли бы быть полезными.

§ 4. Некоторые аналитические свойства S -матрицы

Рассмотрим многоканальную систему $a_i + X_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$) и будем обозначать через k_1 волновой вектор самой легкой пары частиц $a_1 + X_1$, а через x_i — те значения k_1 , при которых открывается i -й канал:

$$\frac{\hbar^2 x_i^2}{2m_1} = Q_i.$$

В плоскости комплексных k_1 точкам x_2, x_3, \dots, x_n отвечают точки ветвления элементов S -матрицы. Действительно, элементы матрицы рассеяния S_{ij} зависят не только от k_1 , но и от волновых векторов частиц всех каналов k_i :

$$k_i = \sqrt{\frac{2m_i}{\hbar^2} (E - Q_i)}, \quad E = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1}.$$

Проще всего это видно из того, что элементы S_{ij} определяются шиванием «внутренних» функций с внешними, а в последние ($\psi_i^{(\pm)}$) входят как раз k_i , а не полная энергия.

Таким образом, чтобы сделать S_{ij} однозначной функцией комплексной переменной k_1 , в плоскости k_1 надо сделать разрезы; мы проведем их так, как изображено на рис. 41. На отрезке (Ox_2) будет иметься, как мы уже знаем (см. § 1), лишь одно регулярное во всем пространстве решение, на участке (x_2, x_3) — два, на участке (x_3, x_4) — три и т. д.

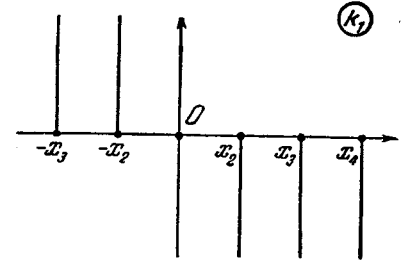


Рис. 41.

Возьмем теперь какое-нибудь из имеющих физический смысл на участке (x_i, x_{i+1}) решений (пусть $j \leq i$):

$$\begin{aligned} \Psi_j &= \Phi_j \psi_j^{(-)} - \sum_{n=1}^N S_{jn}(k_1) \psi_n^{(+)} \Phi_n \sim \\ &\sim \Phi_j \frac{1}{\sqrt{v_j}} e^{-ik_j r_j} - \sum_{n=1}^N S_{jn}(k_1) \frac{1}{\sqrt{v_n}} e^{ik_n r_n} \Phi_n \quad (4.1) \end{aligned}$$

и аналитически продолжим его в верхнюю полуплоскость. Так как разрезы уже проведены, то такое продолжение однозначно. Функции $\psi_n^{(+)} \sim \frac{1}{\sqrt{v_n}} e^{ik_n r_n}$ в верхней полуплоскости k_1 экспоненциально затухают при $r \rightarrow \infty$. Отсюда сразу же заключаем, что ни один

из элементов S -матрицы не может иметь полюсов в верхней полуплоскости k_1 (кроме мнимой оси). Действительно, пусть S_{in} имеет полюс в точке k_r . Разделим (4.1) на S_{in} . Полученная функция будет, очевидно, являться снова везде регулярной волновой функцией.

В пределе $k_1 \rightarrow k_r$ эта функция перейдет в $\sum_{n=1}^N \frac{S_{jn}}{S_{in}} \psi_n^{(+)} \Phi_n$, которая по условию регулярна при всех r . Таким образом, $\frac{\hbar^2 k_r}{2m_1}$ являлось бы в этом случае собственным значением энергии. Но это невозможно для k_r , не лежащих на мнимой оси, так как в противном случае собственное значение энергии было бы комплексным, в противоречии с эрмитовостью гамильтониана. Как видно из этого рассуждения, сформулированная теорема распространяется на все без исключения элементы S -матрицы.

Пусть теперь имеется связанное состояние нашей системы с энергией $E_0 = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_1}$. Нетрудно видеть (Г. Брейт, 1959), что в точке $k_1 = ik_0$ все элементы S_{ij} имеют полюс, т. е. при $k \rightarrow ik_0$ ведут себя как

$$S_{ij} = \frac{C_{ij}}{k_1 - ik_0}; \quad C_{ij} = \text{const.} \quad (4.2)$$

В самом деле, $\psi_j^{(-)}$ в верхней полуплоскости k_1 расходуется экспоненциально при больших r . Следовательно, при аналитическом продолжении функций (4.1) на мнимую ось k_1 этот член должен выпасть при $k_1 = ik_0$. Но это может быть лишь в том случае, когда хотя бы одна из величин S_{jn} обращается в этой точке в бесконечность, так как тогда всю функцию ψ_j можно разделить на обращаящийся в бесконечность элемент S_{jn} , и член $\frac{1}{S_{jn}} \psi_j^{(-)}$ обратится в нуль при $k_1 = ik_0$. Вместе с тем очевидно, что если хотя бы один из элементов S -матрицы стремится к бесконечности, то и все остальные элементы S -матрицы стремятся к бесконечности по тому же самому закону. Действительно, волновая функция связан-

ного состояния Ψ_0 должна иметь асимптотический вид

$$\Psi_0 \sim \sum_{n=1}^N A_n e^{-|k_{n0}|r} \Phi_n, \quad |k_{n0}| = \sqrt{\frac{2m_n}{\hbar^2} (Q_n + E_0)}, \quad (4.3)$$

где сумма распространяется на все каналы. Так как частицы разных каналов могут в принципе переходить в частицы всех других каналов, то все A_n отличны от нуля. Поэтому при аналитическом продолжении функций (4.1) с любым j в точку ik_0 из выражения для волновой функции должен выпасть только один член $\psi_j^{(-)}$ и при этом $\Psi_j \rightarrow \Psi_0 \times \text{const.}$ Это может случиться лишь в том случае, если все элементы S_{jn} в окрестности точки ik_0 имеют вид (4.2), причем, очевидно, для всех j и n должны выполняться равенства

$$C_{jn} = b_j A_n \sqrt{v_n}. \quad (4.4)$$

В противном случае, используя различные функции ψ_j , мы получили бы разные формулы для волновой функции Ψ_0 связанного состояния. Из формул (4.2) и (4.4) сразу же следует, что детерминант, составленный из вычетов элементов S -матрицы, и все его миноры в точке связанного состояния обращаются в нуль. Что касается полюсов S_{ij} в нижней полуплоскости k_1 , то, как и в случае обычного у. Ш., они соответствуют квазистационарным состояниям системы.

Ряд сведений об аналитических свойствах S -матрицы можно найти также в работе М. Като (1965).

§ 5. Ограничения на величину вычетов элементов S -матрицы

Когда в предыдущих главах разбирались свойства величины $S = e^{2i\delta}$, была установлена верхняя граница для вычета S в точке связанного состояния. Аналогичные теоремы можно вывести и в случае многоканальных систем.

Прежде всего заметим, что закон сохранения числа частиц в случае многоканальной системы, являясь

естественным обобщением одноканальной формулы, имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V dr \left(\sum_{j=1}^N |\psi_j|^2 \right) = \oint_S dS \left(\sum_{j=1}^N \frac{i\hbar}{2m_j} (\psi_j^* \nabla \psi_j - \psi_j \nabla \psi_j^*) \right), \quad (5.1)$$

где поверхность S — это внешняя поверхность объема V , ψ_j — волновая функция частиц j -го канала, m_j — приведенная масса частиц j -го канала.

Переходя на язык матриц, т. е. записывая полную волновую функцию системы как

$$\hat{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{\Psi}^+ = (\psi_1^*, \psi_2^*, \dots, \psi_N^*),$$

перепишем формулу (5.1) в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \int dr \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} = \oint_S dS \frac{i\hbar}{2} (\hat{\Psi}^+ \hat{M}^{-1} \nabla \hat{\Psi} - (\nabla \hat{\Psi}^+) \hat{M}^{-1} \hat{\Psi}),$$

где

$$\hat{M}^{-1} = \begin{pmatrix} m_1^{-1} & & & 0 \\ & m_2^{-1} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & m_N^{-1} \end{pmatrix}.$$

Если во всех каналах частицы бесспиновые, то из закона сохранения момента следует, что переходы между каналами

$$a_i + X_i \rightleftharpoons a_j + X_j$$

возможны лишь, если и справа и слева частицы находятся в состояниях с одинаковым l . Для простоты будет рассматриваться только этот случай.

Пусть при заданном l наша многоканальная система имеет связанное состояние с энергией

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_{10}^2}{2m_1}; \quad k_{10} = ik_0$$

и нормированной волновой функцией

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \sim e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} A_1 e^{-|k_{10}|r} \\ A_2 e^{-|k_{20}|r} \\ \vdots \\ A_N e^{-|k_{N0}|r} \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

где $|k_{i0}|$ — абсолютные значения волновых векторов частиц в i -м канале, соответствующие энергии E_0 .

При действительных k волновые функции имеют вид

$$\Psi_j = \left(\Phi_j \psi_j^{(-)} - \sum_{i=1}^N S_{ji} \psi_i^{(+)} \Phi_i \right) Y_{lm}. \quad (5.3)$$

Используя формулы (5.1) — (5.3), можно точно таким же способом, как и в гл. III, получить формулу

$$S_{jj}(k_1) \xrightarrow{k_1 \rightarrow ik_0} \frac{(-1)^{l+1} i |A_j|^2}{k_j - ik_{j0}} = \frac{m_1 k_{j0}}{m_j k_{10}} \frac{(-1)^{l+1} i |A_j|^2}{k_1 - ik_0}, \quad (5.4)$$

связывающую величину вычета диагонального элемента S -матрицы с нормировочной постоянной A_j в волновой функции связанного состояния. Вспоминая формулу (4.4) предыдущего параграфа, находим, что входящая туда постоянная b_j равна

$$b_j = (-1)^{l+1} i A_j^* \frac{V \sqrt{v_{j0}}}{v_{10}}, \quad (5.5)$$

где v_{j0} — скорость, соответствующая волновому вектору k_{j0} .

Таким образом, приходим к общей формуле

$$S_{ji}(k_1) \xrightarrow{k_1 \rightarrow ik_0} \frac{C_{ji}}{k_1 - ik_0}, \quad (5.6)$$

где вычет C_{ji} равен

$$C_{ji} = i(-1)^{l+1} \sqrt{\frac{v_{i0}v_{j0}}{v_{i0}^2}} A_i A_j^* \quad (5.7)$$

Эта формула является обобщением соответствующего соотношения для одноканальной системы (§ 3 гл. III) и она позволяет установить верхнюю границу для вычетов C_{ji} .

Для простоты будем рассматривать случай $l = 0$.

Если радиус взаимодействия R равен нулю, т. е. взаимодействие точечное, то выражение (5.2) для волновой функции связанного состояния верно всюду, кроме точки $r = 0$. Условие нормировки имеет вид

$$\sum_{i=1}^N |A_i|^2 \frac{1}{2|k_{i0}|} = 1. \quad (5.8)$$

Если все $A_i \neq 0$, то, очевидно,

$$|A_i|^2 < 2|k_{i0}| \quad (5.9)$$

и

$$|C_{ji}| < 2 \left| \frac{v_{i0}v_{j0}}{v_{i0}} \right| \frac{\sqrt{m_i m_j}}{\hbar}, \quad (5.10)$$

причем, в отличие от одноканальной системы, где при $R = 0$ имеется равенство

$$|C| = 2|k_0|,$$

(5.10) представляет собой строгое неравенство. Причина этого в том, что в одноканальной системе волновая функция состоит из членов, соответствующих только одной паре частиц. В многоканальной системе, однако, Ψ_0 содержит в себе частицы всех каналов, так что на долю каждого канала приходится сравнительно небольшая часть полной волновой функции, что и отражается неравенствами (5.9) и (5.10).

Существенно отметить, что данные о рассеянии и реакциях, из которых можно в принципе извлечь все величины S_{ji} , позволяют с помощью (5.6), (5.7) найти вычеты C_{ji} путем аналитического продолжения S_{ji} в

комплексную плоскость и, следовательно, — нормировочные постоянные A_i . Таким образом, данные о непрерывном спектре дают возможность восстановить структуру связанного состояния.

Если радиус взаимодействия R отличен от нуля, то формула (5.2) верна только при $r > R$. Из условия нормировки получаем аналогично тому, как это делалось в § 3 гл. III, что

$$\sum_{i=1}^N |A_i|^2 \frac{1}{2|k_{i0}|} e^{-2|k_{i0}|R} < 1, \quad (5.11)$$

и неравенства (5.9), (5.10) делаются более слабыми:

$$|A_i|^2 < 2|k_{i0}| e^{2|k_{i0}|R}, \quad (5.12)$$

$$|C_{ij}| < 2 \left| \frac{v_{i0}v_{j0}}{v_{i0}} \right| \frac{\sqrt{m_i m_j}}{\hbar} e^{(|k_{i0}| + |k_{j0}|)R}. \quad (5.13)$$

Наиболее важным следствием этого является то, что, сравнивая экспериментально полученные величины C_{ji} с неравенствами (5.10), (5.13), можно в принципе оценить величину радиуса взаимодействия.

§ 6. Выражение для S-матрицы. Ее связь с R-матрицей

В общем случае N -канальной системы S -матрица зависит от $\frac{1}{2}N(N+1)$ параметров. Как правило, об этих параметрах ничего не известно, так как, прежде всего, мало изучены взаимодействия между частицами. Известно, однако, что эти взаимодействия обычно велики по абсолютной величине и имеют малый радиус действия. Поэтому обычно реакцию рассматривают происходящей в три этапа: 1) частицы налетают друг на друга, но до тех пор, пока расстояние между ними больше радиуса реакции R , они не взаимодействуют (кулоновское взаимодействие пока не учитываем); 2) при $r \leq R$ взаимодействие сразу становится большим и образуется так называемая промежуточная система и

3) промежуточная система разлетается, и когда расстояние между образовавшимися частицами становится большим чем R , взаимодействие сразу исчезает.

Оказывается, что, используя такую картину, можно получить довольно сильные теоремы о поведении сечений рассеяния и реакций. Но для этого необходимо выразить элементы S -матрицы через значения волновых функций и их производных в области $r < R$. Эта задача впервые была решена П. Капуром и Р. Пайерлсом (1938) и Е. Вигнером и Л. Айзенбудом (1947). Лэйном и Томасом (1958) был написан очень подробный обзор на эту тему.

Идея заключается в следующем. Пусть система имеет N открытых каналов $a_i + X_i$. Вне области реакции, т. е. при $r > R$, переходы $X_i + a_i \rightarrow X_j + a_j$ между каналами невозможны по самому определению радиуса реакции.

Наиболее общую волновую функцию при $r > R$ запишем в матричном виде как

$$(\bar{\psi}^{(-)} - \bar{\psi}^{(+)} \hat{S}) \hat{v} \equiv \begin{pmatrix} \psi_1^{(-)} & & & 0 \\ & \psi_2^{(-)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \psi_N^{(-)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \psi_1^{(+)} & & & 0 \\ & \psi_2^{(+)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \psi_N^{(+)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \dots \\ S_{21} & S_{22} & \dots \\ & & \ddots \\ & & & S_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

где матрица-столбец \hat{v} состоит из произвольных чисел v_i , а $\psi_i^{(-)}$ и $\psi_i^{(+)}$ — волновые функции, описывающие сходящиеся и расходящиеся волны частиц i -го канала.

В области реакции $r < R$ также имеется N регулярных решений. Обозначим их значения и значения их

производных при $r = R$ через

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} \alpha_{i1} \\ \alpha_{i2} \\ \vdots \\ \alpha_{iN} \end{pmatrix}, \quad \Psi'_i = \begin{pmatrix} \alpha'_{i1} \\ \alpha'_{i2} \\ \vdots \\ \alpha'_{iN} \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (6.2)$$

Наиболее общее решение при $r < R$ можем записать как

$$\hat{\Psi} \hat{a} = \sum_{i=1}^N a_i \Psi_i; \quad \hat{\Psi} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \dots & \alpha_{N1} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{N2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{1N} & \alpha_{2N} & \dots & \alpha_{NN} \end{pmatrix}; \quad \hat{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix}. \quad (6.3)$$

Матрица \hat{a} опять произвольна. Аналогично запишем и выражение для производной как

$$\hat{\Psi}' \hat{a} \equiv \sum_{i=1}^N a_i \Psi'_i. \quad (6.4)$$

Сошьем волновые функции и их производные на границе. Имеем два матричных уравнения

$$\left. \begin{aligned} \hat{\Psi} \hat{a} &= (\bar{\psi}^{(-)} - \bar{\psi}^{(+)} \hat{S}) \hat{v}, \\ \hat{\Psi}' \hat{a} &= (\bar{\psi}'^{(-)} - \bar{\psi}'^{(+)} \hat{S}) \hat{v}. \end{aligned} \right\} \quad (6.5)$$

Из них элементарно получаем

$$\hat{S} = (R_1 \bar{\psi}^{(+)} - \bar{\psi}^{(+)})^{-1} (\hat{R}_1 \bar{\psi}^{(-)} - \bar{\psi}^{(-)}), \quad (6.6)$$

где \hat{R}_1 — квадратная матрица:

$$\hat{R}_1 = \hat{\Psi}' \hat{\Psi}^{-1}. \quad (6.7)$$

Таким образом, первая часть задачи выполнена: связь S -матрицы с волновыми функциями во внутренней области установлена. Остается найти свойства матрицы \hat{R}_1 .

Известны два свойства S -матрицы — ее унитарность и симметрия:

$$\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+; \quad \hat{S}^+ = \hat{S}^*.$$

Исходя из этих уже известных соотношений, можно найти свойства введенной матрицы \hat{R}_1 . Элементарные вычисления показывают, что унитарность S -матрицы приводит к соотношению

$$\hat{R}_1 \hat{M} = \hat{M} \hat{R}_1^+, \quad (6.8)$$

где \hat{M} — диагональная квадратная матрица масс:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} m_1 & & & 0 \\ & m_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & m_N \end{pmatrix},$$

а m_i — приведенная масса частиц i -го канала. Второе свойство S -матрицы — ее симметрия — приводит к действительности матрицы \hat{R}_1 :

$$\hat{R}_1 = \hat{R}_1^*. \quad (6.8')$$

На этом этапе удобно ввести новую матрицу \hat{R} :

$$\hat{R} = \hat{R}_1 \hat{M}.$$

Из свойств \hat{R}_1 видно, что новая матрица \hat{R} действительна и эрмитова. Другими словами, ее элементы действительны и симметричны при перестановке индексов:

$$R_{ik} = R_{ik}^* = R_{ki}. \quad (6.9)$$

Это означает, что \hat{R} -матрица целиком определяется $\frac{N(N+1)}{2}$ действительными параметрами.

В случае двухканальной системы, например, это число равно трем:

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{12} & R_{22} \end{pmatrix}.$$

Соответственно только через три действительных параметра выражается и S -матрица — уже известный нам результат.

Рассмотрим для иллюстрации двухканальную систему. Формула (6.6) приводит в этом случае к следующему выражению для элементов S -матрицы:

$$\left. \begin{aligned} S_{11} &= \frac{1}{Dm_1m_2} \{ (R_{11}\psi_1^{(-)} - m_1\psi_1^{(-)'}) (R_{22}\psi_2^{(+)} - m_2\psi_2^{(+)}) - \\ &\quad - R_{12}^2\psi_1^{(-)}\psi_2^{(+)} \}, \\ S_{12} = S_{21} &= -\frac{2i}{\hbar} \frac{R_{12}}{D}, \\ S_{22} &= \frac{1}{Dm_1m_2} \{ (R_{11}\psi_1^{(+)} - m_1\psi_1^{(+)}) (R_{22}\psi_2^{(-)} - m_2\psi_2^{(-)'}) - \\ &\quad - R_{12}^2\psi_1^{(+)}\psi_2^{(-)} \}, \\ D &= \frac{1}{m_1m_2} \{ (R_{11}\psi_1^{(+)} - m_1\psi_1^{(+)}) (R_{22}\psi_2^{(+)} - m_2\psi_2^{(+)}) - \\ &\quad - R_{12}^2\psi_1^{(+)}\psi_2^{(+)} \}. \end{aligned} \right\} \quad (6.10)$$

В случае систем с числом каналов, большим чем два, выражения для элементов S -матрицы получаются более громоздкими, но структура их остается той же самой. Они имеют вид дроби, числитель и знаменатель которой являются полиномами N -й степени (N — число каналов) от внешних волновых функций $\psi_i^{(\pm)}$ и их производных, взятых при $r = R$.

§ 7. Среднее время жизни состояний непрерывного спектра

В § 10 гл. VII мы решали задачу о том, каково среднее время, проводимое рассеиваемой частицей внутри сферы радиуса a , вне которой потенциал равен нулю. Сейчас мы решим аналогичную задачу для случая многоканальной системы и посмотрим, как многоканальность влияет на время жизни. Полученные в предыдущих параграфах формулы позволяют полностью решить эту проблему.

Итак, пусть у системы есть N каналов $a_i + X_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$), из которых только первый с $i = 1$ открыт в рассматриваемом нами интервале энергий. Единственным энергетически разрешенным процессом является упругое рассеяние

$$a_1 + X_1 \rightarrow a_1 + X_1. \quad (7.1)$$

Спрашивается, каково для этого процесса среднее время, в течение которого частицы системы находятся внутри сферы радиуса $r = a$? Радиус R области, в которой происходят переходы из канала в канал, предполагается меньшим чем a .

Чтобы измерить T_{11} , воспользуемся тем же приемом, что в § 10 гл. VII: будем считать, что внутри сферы $r = a$ имеется слабое однородное магнитное поле H , направленное по оси z , а у всех частиц a_i ($i = 1, \dots, N$) имеется магнитный момент $\mu = \mu_S$ (один и тот же для всех i). Сталкивающиеся частицы будем считать поляризованными вдоль оси x . Внутри области взаимодействия сталкивающиеся частицы $a_1 + X_1$ могут перейти в любую другую пару $a_k + X_k$ ($k = 1, \dots, N$), которая в свою очередь может превратиться в следующую пару $a_l + X_l$ и т. д. Но эти переходы не будут влиять на работу наших «часов» (т. е. на прецессию магнитного момента вокруг направления H), так как по условию все a_i имеют одинаковый магнитный момент μ . Поэтому время жизни T_{11} можно определить как

$$T_{11} = \frac{\theta}{\omega},$$

где θ — угол между направлением μ и осью x , определяющей направление ушедшей на бесконечность частицы a_1 , а $\omega = \frac{2\mu H}{\hbar}$ — частота вращения спина в магнитном поле.

Чтобы вычислить θ , заметим следующее. В S -матрицу, описывающую процесс (7.1), входят величины двойного рода (см. (6.6)): а) элементы R -матрицы, которые зависят только от взаимодействия между частицами внутри области реакции; б) функции $\psi_i^{(\pm)}$ и $\psi_i^{(\pm)'}$, зависящие только от поведения частиц в разных кана-

лах вне области реакции (напомним, что $\psi_i^{(\pm)}$ нормированы их асимптотическим поведением

$$\psi_i^{(\pm)} \sim \frac{1}{\sqrt{v_i}} e^{\pm i \left(k_i r - \frac{ln}{2} \right)}.$$

Везде дальше будем считать, что граница между внешней и внутренней областями проходит по поверхности сферы $r = a$, внутри которой действует поле H .

Хотя по условию открытым является только первый канал, нам надо учитывать существование всех остальных $(N-1)$ каналов. Это будет достигнуто, если для элементов S -матрицы мы будем пользоваться формулами § 6, которые верны вне зависимости от того, сколько из каналов открыто при рассматриваемой энергии. Нам будет удобно поэтому рассматривать полную $N \times N$ матрицу S , хотя процесс (7.1) описывается лишь одним ее членом.

Пусть известен вид S -матрицы в отсутствие поля*):

$$\hat{S} = (\hat{\psi}^{(+)} - \hat{R}\hat{\psi}^{(+)})^{-1} (\hat{\psi}^{(-)} - \hat{R}\hat{\psi}^{(-)}). \quad (7.2)$$

Введение поля внутри сферы $r = a$ эквивалентно изменению энергии частиц внутри этой сферы. Для частиц со спином вдоль H ($s_z = 1/2$) вместо энергии E входит теперь $E + \mu H$, а для частиц со спином против поля ($s_z = -1/2$) входит $E - \mu H$. Это приводит к изменению элементов \hat{R} -матрицы:

$$R_{ik} \rightarrow R_{ik} \pm \mu H \frac{dR_{ik}}{dE} \quad \text{для } s_z = \pm \frac{1}{2}.$$

В то же время «внешние» функции $\psi^{(\pm)}$ при введении магнитного поля при $r < a$ не меняются. Таким образом, S -матрица для состояний с $s_z = \pm 1/2$ превращается в

$$\hat{S} \pm \mu H \frac{\delta \hat{S}}{\delta E} \equiv \left[\hat{\psi}^{(+)} - \left(\hat{R} \pm \mu H \frac{d\hat{R}}{dE} \right) \hat{\psi}^{(+')} \right]^{-1} \times \\ \times \left[\hat{\psi}^{(-)} - \left(\hat{R} \pm \mu H \frac{d\hat{R}}{dE} \right) \hat{\psi}^{(-')} \right], \quad (7.3)$$

*) Здесь используется определение R -матрицы, данное в обзоре А. Лейна и Р. Томаса (1958).

где $\frac{d}{dE}$ — обычная производная по энергии, а $\frac{\delta}{\delta E}$ означает, что при дифференцировании \hat{S} все «внешние» величины считаются постоянными.

Так как \hat{R} -матрица может быть выражена с помощью (7.2) через \hat{S} , $\hat{\psi}^{(\pm)}$ и $\hat{\psi}^{(\pm) \prime}$, то $\frac{\delta \hat{S}}{\delta E}$ также может быть выражена через эти величины. В результате простых вычислений получаем

$$\begin{aligned} \frac{\delta \hat{S}}{\delta E} = & \frac{d\hat{S}}{dE} + \frac{d\hat{\psi}^{(+)}}{dE} (\hat{\psi}^{(+)})^{-1} \hat{S} - \hat{S} (\hat{\psi}^{(-)})^{-1} \frac{d\hat{\psi}^{(-)}}{dE} - \\ & - \frac{1}{2} (\hat{S} - \hat{\psi}^{(-)} (\hat{\psi}^{(+)})^{-1}) \frac{d\hat{k}}{dE} \hat{k}^{-1} \hat{\psi}^{(+)} (\hat{\psi}^{(-)})^{-1} (\hat{S} + \hat{\psi}^{(-)} (\hat{\psi}^{(+)})^{-1}), \end{aligned} \quad (7.4)$$

где \hat{k} — диагональная матрица волновых векторов, величины $\hat{\psi}^{(\pm)}$ и $\hat{\psi}^{(\pm) \prime}$ должны вычисляться на сфере $r = a$.

Волновая функция сталкивающихся частиц $a_1 + X_1$ есть (μ направлен по оси x)

$$\psi_1^{(-)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Волновая функция образовавшихся в реакции частиц $a_1 + X_1$ есть, очевидно,

$$\psi_1^{(+)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} S_{11} + \mu H \frac{\delta S_{11}}{\delta E} \\ S_{11} - \mu H \frac{\delta S_{11}}{\delta E} \end{pmatrix} = S_{11} \psi_1^{(+)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 + \mu H \frac{1}{S_{11}} \frac{\delta S_{11}}{\delta E} \\ 1 - \mu H \frac{1}{S_{11}} \frac{\delta S_{11}}{\delta E} \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Такая спиновая функция отвечает углу между μ и осью x , равному

$$\theta = 2\mu H \operatorname{Im} \left(\frac{1}{S_{11}} \frac{\delta S_{11}}{\delta E} \right).$$

Поэтому среднее время жизни T_{11} равно (А. И. Базь, 1967) *)

$$T_{11} = \hbar \operatorname{Im} \left(\frac{1}{S_{11}} \frac{\delta S_{11}}{\delta E} \right). \quad (7.6)$$

В дальнейшем нам понадобится явное выражение T_{11} для двухканальной системы ($l = 0$). В этом случае S -матрицу можно всегда записать как

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \alpha e^{2i\delta_1} & i\beta e^{i(\delta_1 + \delta_2)} \\ i\beta e^{i(\delta_1 + \delta_2)} & \alpha e^{2i\delta_2} \end{pmatrix} \quad (7.7)$$

(эта матрица симметрична и унитарна, если α и β действительны и $\alpha^2 + \beta^2 = 1$). Используя (7.4) и (7.6), легко получаем

$$\begin{aligned} T_{11} = & \frac{2}{v_1} \operatorname{Im} \left\{ i \left(\frac{d\delta_1}{dk_1} + a \right) - \frac{1}{4k} \left(\alpha e^{2i(k_1 a + \delta_1)} - \frac{1}{\alpha} e^{-2i(k_1 a + \delta_1)} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\beta^2 v_1}{4\alpha v_2 k_2} e^{2i(k_2 a + \delta_2)} \right\}; \end{aligned} \quad (7.8)$$

здесь k_1 , v_1 и k_2 , v_2 — волновые векторы и скорости частиц в первом и втором каналах соответственно.

*) Имеются работы (например, Ф. Смит, 1960), в которых получен результат $T_{11} = \hbar \operatorname{Im} \left(\frac{1}{S_{11}} \frac{dS_{11}}{dE} \right)$, где $\frac{d}{dE}$ — полная производная. Этот результат в общем случае неправилен (Е. Вигнер, 1948). Он соответствует лишь квазиклассическому приближению (и то не всегда).

ГЛАВА IX ПОРОГОВЫЕ ЯВЛЕНИЯ

Как показывает опыт, все взаимодействия между частицами (кроме кулоновского) обладают сравнительно малым радиусом действия, но велики по абсолютной величине. Это свойство позволяет сделать ряд важных предсказаний о поведении сечений различных процессов. Наиболее полно этот вопрос был исследован Е. Вигнером (1948). Он рассматривал систему с несколькими каналами

$$a_i + X_i \rightarrow a_j + X_j$$

и показал, что, пользуясь лишь короткодействием ядерных сил, можно в общем виде вычислить энергетическую зависимость:

а) сечений упругого рассеяния $X_i(a_i, a_i)X_i$ при малых энергиях рассеиваемых частиц,

б) сечений реакций $X_i(a_i, a_j)X_j$ при малых энергиях начальных или конечных частиц.

Эти результаты были значительно расширены в последние годы, так как оказалось возможным решить общую задачу об энергетической зависимости сечения процесса $X_i(a_i, a_j)X_j$ вблизи порога любого другого процесса $X_i(a_i, a_k)X_k$.

§ 1. Энергетическая зависимость сечения упругого рассеяния при малых энергиях

Пусть взаимодействие V между частицами a и X имеет конечный радиус R .

Рассмотрим состояние, в котором a и X имеют заданный орбитальный момент l , причем $r > R$. У. Ш. для умноженной на r радиальной части волновой функции

$\chi_l(r) \equiv rR_l(r)$ при $r > R$ имеет вид (пока рассматриваем нейтральные частицы)

$$\chi_{kl}'' + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi_{kl} = 0, \quad (1.1)$$

где $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ — волновой вектор относительного движения частиц a и X , E — их энергия в системе центра масс, а m — приведенная масса. Наиболее общее выражение для χ_{kl} в этой области можно записать так:

$$\chi_{kl}(r) = A_l(k) \left[\psi_l^{(-)}(kr) - S_l(k) \psi_l^{(+)}(kr) \right], \quad (1.2)$$

где A и S — некие постоянные, зависящие от k (или от E), а $\psi_l^{(\pm)}$ — пара решений, имеющих на бесконечности асимптотический вид расходящихся и сходящихся волн:

$$\psi_l^{(\pm)}(kr) = \left(\frac{m\pi r}{2\hbar} \right)^{1/2} \left[(-1)^l J_{-(l+1/2)}(kr) \pm i J_{l+1/2}(kr) \right], \quad (1.3)$$

$$\psi_l^{(\pm)}(kr) \sim \frac{1}{\sqrt{v}} e^{\pm i \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right)}.$$

Здесь $J_{\pm(l+1/2)}$ — это обычные функции Бесселя. Нормированные таким образом функции описывают падающую (—) и расходящуюся (+) волны, соответствующие единичным потокам через сферу большого радиуса.

При $r = R$ решение (1.2) должно сшиваться с регулярным решением при $r < R$. Во внутренней области энергия частиц E входит в уравнение движения только в виде суммы $(E + V)$ с большим по величине ядерным взаимодействием. Поэтому внутренняя волновая функция $\chi^{(0)}$ должна лишь слабо меняться при малом по сравнению с V изменении энергии.

В первом приближении можно считать, что

$$\frac{\chi^{(0)'}(r)}{\chi^{(0)}(r)} \Big|_{r=R} = z$$

не зависит от E .

Условие сшивания, таким образом, имеет вид

$$\frac{\psi_l^{(-)'} - S \psi_l^{(+)'}(r)}{\psi_l^{(-)} - S \psi_l^{(+)}(r)} \Big|_{r=R} = z \xrightarrow{k \rightarrow 0} \text{const.} \quad (1.4)$$

Учитывая, что при $k \rightarrow 0$

$$\psi_l^{(\pm)}(kr) \sim \left(\frac{\pi m}{\hbar} r\right)^{1/2} \left[\frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1/2}} \pm i \frac{(kr)^{l+1/2}}{(2l+1)!!} \right], \quad (1.5)$$

находим

$$S_l - 1 = \frac{\psi_l^{(-)'} - z\psi_l^{(-)}}{\psi_l^{(+)' - z\psi_l^{(+)}} \Big|_{r=R} - 1 \sim (kR)^{2l+1},$$

откуда для сечения упругого рассеяния получаем следующую энергетическую зависимость:

$$\sigma_l = (2l+1) \frac{\pi}{k^2} |S_l - 1|^2 \underset{k \rightarrow 0}{\sim} k^{4l} \sim E^{2l}, \quad (1.6)$$

т. е. при малых E рассеяние нейтральных частиц происходит только в состоянии с нулевым орбитальным моментом. Парциальные сечения с $l \neq 0$ обращаются в нуль при $k \rightarrow 0$. Физически этот результат очевиден; он описывает отталкивающее действие центробежного барьера.

Если a и X — электрически заряженные частицы с зарядами e_1 и e_2 соответственно, то в уравнении (1.1) появляется кулоновский член

$$\chi_{kl}'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e_1 e_2}{r} \right] \chi_{kl} = 0. \quad (1.7)$$

Общее решение этого уравнения при $r > R$ по-прежнему можно записать в форме (1.2); $\psi_l^{(\pm)}$, однако, теперь выражаются через кулоновские функции:

$$\begin{aligned} \psi_l^{(\pm)}(r) &= \frac{1}{\sqrt{v}} [G_l(\eta, \rho) \pm iF_l(\eta, \rho)] \sim \\ &\sim \frac{1}{\sqrt{v}} e^{\pm i \left(kr - \frac{\pi l}{2} - \eta \ln 2kr + \eta_l \right)}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

где $\eta = \frac{e_1 e_2}{\hbar v}$, $\rho = kr$, G_l и F_l — нерегулярная и регулярная кулоновские функции соответственно, а η_l — кулоновская фаза. Общее решение при $r > R$ запишем как

$$\psi_l = A_l \left[(\psi_l^{(-)} - \psi_l^{(+)}) + (1 - S_l) \psi_l^{(+)} \right]. \quad (1.9)$$

Если A_l положить равным $\frac{i}{2k} \sqrt{v} (2l+1) i^l e^{i\eta_l}$, то первый член совпадает с коэффициентом при $P_l(\cos \theta)$ в точной волновой функции, описывающей кулоновское рассеяние. Как известно из теории рассеяния в кулоновском поле, эта функция содержит рассеянную волну (которую надо домножить на $P_l(\cos \theta)$), чтобы получить амплитуду рассеяния в состоянии с моментом l :

$$\frac{1}{2ik} e^{i(kr - \eta \ln 2kr)} (2l+1) (e^{2i\eta_l} - 1). \quad (1.10)$$

Второй член в (1.9) соответствует дополнительному ядерному рассеянию, и чтобы получить полную рассеянную волну, его надо добавить к (1.10). При этом сразу получаем для полной амплитуды рассеяния в состоянии с моментом l

$$f_l = \frac{2l+1}{2ik} [e^{2i\eta_l} - 1 + e^{2i\eta_l} (S_l - 1)] P_l(\cos \theta). \quad (1.11)$$

При $k \rightarrow 0$ ($k > 0$) кулоновские функции ведут себя как

$$\begin{aligned} F_l &\rightarrow C_l (kr)^{l+1}, \\ G_l &\rightarrow \frac{(kr)^{-l}}{(2l+1) C_l} \left[1 + 2\eta (kr)^{2l+1} \left(\frac{C_l}{C_0} \right)^2 O_l(r) \right], \end{aligned} \quad (1.12)$$

где $O_l(r)$ — некоторая гладкая и не зависящая от k функция r , по порядку величины равная единице, а

$$\begin{aligned} C_l &= C_0 \frac{2^l}{\Gamma(2l+2)} [(1^2 + \eta^2)(2^2 + \eta^2) \dots (l^2 + \eta^2)]^{1/2}, \\ C_0 &= \left[\frac{2\pi\eta}{e^{2\pi\eta} - 1} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Из условия сшивания (1.4) получаем

$$S_l - 1 = -2i \frac{F_l}{G_l} \frac{F_l'/F_l - z}{\frac{G_l'}{G_l} - z + \frac{i}{G_l} (F_l' - zF_l)}. \quad (1.14)$$

Как видно из разложений (1.12), основная энергетическая зависимость содержится в множителе

$$\frac{F_l}{G_l} = C_l^2 \frac{(kr)^{2l+1} (2l+1)}{1 + 2\eta (kr)^{2l+1} \left(\frac{C_l}{C_0} \right)^2 O_l(r)} \Big|_{r=R}. \quad (1.14')$$

При достаточно малых k , когда $\eta^2 \gg l^2$, эта формула упрощается, так как из (1.12) и (1.13) тогда следует:

$$\frac{F_l}{G_l} \approx \frac{\text{const}}{|e^{2i\pi\eta} - 1|}. \quad (1.15)$$

Для одноименно заряженных частиц $\eta > 0$ и

$$|S_l - 1| \approx \frac{F_l}{G_l} \approx e^{-2\pi\eta}. \quad (1.16)$$

В случае разноименно заряженных частиц $\eta < 0$ и

$$|S_l - 1| \approx \text{const}. \quad (1.16')$$

Любопытно, что правые части (1.16), (1.16') не зависят от l в случае $\eta^2 \gg l^2$. Физическая причина этого кроется в том, что центробежный потенциал ($\sim 1/r^2$) спадает гораздо быстрее кулоновского ($1/r$), так что именно последний играет решающую роль.

Парциальное сечение рассеяния равно

$$\begin{aligned} \sigma_l &= \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) |(e^{2i\eta_l} - 1) + e^{2i\eta_l} (S_l - 1)|^2 = \\ &= \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) \{4 \sin^2 \eta_l - 2 \text{Re} [(S_l - 1)(e^{2i\eta_l} - 1)] + \\ &\quad + |S_l - 1|^2\} \equiv \sigma_l^c + \sigma_l^{(1)} + \sigma_l^{(2)}. \quad (1.17) \end{aligned}$$

Первый член здесь — это чисто кулоновская часть рассеяния. Кулоновская фаза при малых k стремится к бесконечности:

$$\eta_l = \frac{1}{2i} \ln \frac{\Gamma(l+1+i\eta)}{\Gamma(l+1-i\eta)} \sim -\eta + \frac{\pi}{2} \left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{\eta}{|\eta|}.$$

Поэтому σ_l^c при $k \rightarrow 0$, осциллируя, стремится к бесконечности как k^{-2} при всех l .

Второй член в (1.17), описывающий интерференцию между ядерным и кулоновским рассеянием, также является осциллирующим. По порядку величины он равен

$$\sigma_l^{(1)} \sim \begin{cases} \frac{1}{k^2} e^{-2\pi\eta} & \text{в случае отталкивания,} \\ \frac{1}{k^2} & \text{в случае притяжения,} \end{cases} \quad (1.18)$$

$\sigma_l^{(2)}$ — чисто ядерная часть сечения — монотонно меняется с изменением энергии:

$$\sigma_l^{(2)} \sim \begin{cases} \frac{1}{k^2} e^{-4\pi\eta} & \text{— отталкивание,} \\ \frac{1}{k^2} & \text{— притяжение.} \end{cases} \quad (1.19)$$

Таким образом, ядерное рассеяние ($\sigma_l^{(1)} + \sigma_l^{(2)}$) в случае одноименно заряженных частиц экспоненциально малό при $k \rightarrow 0$ по сравнению с кулоновским (σ_l^c) и полностью маскируется последним. В случае кулоновского притяжения все три члена в (1.17) одного порядка величины.

Характерной чертой формул (1.18), (1.19) является то, что в них не входит l . Это справедливо в области $\eta^2 \gg l^2$, что эквивалентно условию

$$E \ll \left(\frac{e_1 e_2}{R}\right)^2 / \frac{\hbar^2 l^2}{m R^2}. \quad (1.20)$$

При более высоких энергиях формулы (1.18), (1.19) при данном l становятся неприменимыми.

§ 2. Энергетическая зависимость сечений двухчастичных реакций при малых энергиях начальных или конечных частиц

Пусть при столкновении двух частиц a и X , кроме упругого рассеяния, возможна также и реакция



в которой образуются частицы b и Y . Как и выше, будем сначала рассматривать случай нейтральных бесспиновых частиц. Если через r обозначить расстояние между a и X , а через r_1 — расстояние между b и Y , то вне радиуса взаимодействия волновая функция системы в состоянии с моментом l должна иметь вид (в тех же обозначениях, что и выше)

$$A_l \{ [\Psi_{kl}^{(-)}(r) - S_l \Psi_{kl}^{(+)}(r)] \Phi(a, X) - M_l \Phi_{kl}^{(+)}(r_1) \Phi(b, Y) \}, \quad (2.2)$$

где выражение в квадратных скобках описывает падающую и рассеянную волны частиц $a + X$ (см. (1.2)), а последний член — расходящуюся волну образовавшихся

в результате реакции частиц $b + Y$. $\Phi(i, j)$ — произведение внутренних волновых функций частиц i и j . Здесь M_l — некая функция k , а $\Phi_{k_2 l}^{(+)}$ — это то решение у. Ш. для частиц $b + Y^*$, которое на бесконечности ведет себя как

$$\Phi_{k_2 l}^{(+)}(r_1) \sim \frac{1}{\sqrt{v_2}} e^{i(k_2 r_1 - \frac{l\pi}{2})}$$

(k_2 и v_2 — волновой вектор и скорость частиц $b + Y$). Точное выражение для $\Psi_l^{(+)}$ дается формулой (1.3), в которой надо заменить r на r_1 , k на k_2 и m на m_1 — приведенную массу пары $b + Y$.

Рассмотрим случай, когда реакция идет с поглощением энергии ($Q > 0$), т. е. когда она возможна, только если энергия частиц $a + X$ (в системе ц. м.) $E > Q$. При этом энергия образующихся частиц $b + Y$ равна $E - Q$, и k_2 и v_2 равны

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_1(E - Q)}{\hbar^2}}; \quad v_2 = \frac{k_2 \hbar}{m_1}. \quad (2.3)$$

Волновая функция (2.2) при $r_1 = R$ должна непрерывным образом сшиваться с внутренней волновой функцией, и именно условия сшивания определяют значения величин S_l и M_l . Функция во внутренней области нам неизвестна, так как характер взаимодействия не конкретизировался. Известно, однако, что она конечна. Это означает, что при $r = R$ должно быть конечным и произведение $M_l \Phi_{k_2 l}^{(+)}(R)$. При $k_2 \rightarrow 0$ $\Phi_l^{(+)} \sim k_2^{-(l+1/2)}$, и для конечности произведения необходимо, чтобы было

$$M_l(k_2) \sim \frac{1}{\Phi_{k_2 l}^{(+)}(R)} \sim k_2^{l+1/2}. \quad (2.4)$$

Сечение реакции

$$\sigma_l^{\text{реак}} = \frac{\pi}{k_1^2} (2l + 1) |M_l|^2 \sim k_2^{2l+1}. \quad (2.5)$$

*) Заметим, что говорить об у. Ш. для частиц можно, только если расстояние между ними $r_1 > R$, т. е. если они свободны. При $r_1 < R$ частицы $b + Y$ нельзя рассматривать отдельно от $a + X$, так как возможны переходы $a + X \rightleftharpoons b + Y$ и система описывается каким-то более сложным уравнением.

Таким образом, вблизи порога рождения двух медленных нейтральных частиц их образование происходит в основном в состоянии с $l = 0$.

Найдем теперь энергетическую зависимость обратной реакции



при малых энергиях E_2 частиц $b + Y$. Сечение этой реакции, как известно, равно

$$\sigma_l^{\text{обр}} = \frac{\pi}{k_2^2} (2l + 1) |M_l|^2$$

и определяется тем же самым элементом матрицы рассеяния M_l , что и прямая реакция. Для энергетической зависимости сразу же получаем

$$\sigma_l^{\text{обр}} \underset{k_2 \rightarrow 0}{\sim} k_2^{2l-1}. \quad (2.7)$$

При малых k_2 реакция идет в основном в состоянии с $l = 0$, а сечение реакции

$$\sigma_0 \sim \frac{1}{k_2}. \quad (2.8)$$

Это — известный «закон $1/v$ », описывающий энергетическую зависимость захвата ядрами медленных нейтронов.

Так как основную роль играет состояние с $l = 0$, то сечение поглощения или образования медленных частиц сферически-симметричны.

Энергетические зависимости (2.5) — (2.7) определяют исключительно видом волновых функций $\Phi_l^{(+)}$ медленных частиц в состоянии с данным орбитальным моментом и условием конечности волновой функции системы; от свойств быстрых частиц эти формулы не зависят. В частности, a и X могут быть даже заряженными частицами.

Дело существенно меняется, однако, если заряженными являются медленные частицы.

В этом случае $\Phi_l^{(+)}$ выражается через кулоновские функции:

$$\Phi_l^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{v_2}} (G_l + iF_l)$$

и с помощью (1.12), (1.13) получаем;

для реакции $X(a, b)Y$ (образуются медленные заряженные частицы)

$$\sigma_l^{\text{реак}} = \frac{\pi}{k_1^2} (2l+1) |M_l|^2 \sim \frac{1}{k_1^2} \frac{1}{|\varphi_l^{(+)}|^2} \sim \begin{cases} e^{-2\pi\eta}, & \text{если } b \text{ и } Y \text{ одноименно заряжены,} \\ \text{const,} & \text{если } b \text{ и } Y \text{ разноименно заряжены;} \end{cases} \quad (2.9)$$

для реакции $Y(b, a)X$ (сталкиваются медленные заряженные частицы)

$$\sigma_l \sim \frac{1}{k_2^2} \frac{1}{|\varphi_l^{(+)}|^2} \sim \begin{cases} \frac{1}{k_2^2} e^{-2\pi\eta}, & \text{если } b \text{ и } Y \text{ одноименно} \\ & \text{заряжены,} \\ \frac{1}{k_2^2}, & \text{если } b \text{ и } Y \text{ разноименно} \\ & \text{заряжены.} \end{cases} \quad (2.10)$$

Условие применимости этих формул — то же, что и в случае упругого рассеяния заряженных частиц (формула (1.20) предыдущего параграфа). Характерной чертой является независимость от l величин σ_l при $\eta^2 \gg l^2$. Причина этого — та же, что и раньше: кулоновский барьер гораздо «шире» центробежного, и поэтому последний играет при малых энергиях лишь сравнительно небольшую роль. Если частицы b и Y одноименно заряжены, то сечение их захвата или рождения экспоненциально мало и независимость σ_l от l не играет большой роли.

В случае разноименно заряженных частиц, однако, положение меняется, так как сечения σ_l с $l \neq 0$ не малы, и даже при очень малых энергиях в реакции принимает участие большое число парциальных волн. В результате сечение сохраняет угловую анизотропию вплоть до самых малых энергий, в отличие от случая нейтральных частиц.

Другой любопытной чертой сечения образования медленных разноименно заряженных частиц является то, что сечение оказывается конечным, начиная с самого порога. В точке порога, таким образом, сечение должно скачком

обращаться в нуль. На самом деле, конечно, скачка не происходит. Дело в том, что образование заряженных частиц сопровождается испусканием γ -квантов, и учет этого обстоятельства, как показал В. М. Галицкий, приводит к хотя и очень крутому, но плавному (не скачкообразному) спаду сечения к нулю при $k_2 \rightarrow 0$. Таким образом, в этом случае сечение очень быстро возрастает при удалении от порога реакции, приближаясь к постоянной.

Для удобства ниже приводятся табл. 1 и 2, в которых сведены все результаты этого и предыдущего параграфов.

Таблица 1

Рассеяние медленных частиц

Между a и X нет кулоновского взаимодействия	a и X одноименно заряжены	a и X разноименно заряжены
	$\sigma_l = \sigma_l^c + \sigma_l^{(1)} + \sigma_l^{(2)}$	$\sigma_l^c = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \eta_l$
$\sigma_l \sim k^{4l}$	$\sigma_l^{(1)} \sim k^{-2} e^{-2\pi\eta} \times$ \times (осциллирующий множитель) $\sigma_l^{(2)} \sim k^{-2} e^{-4\pi\eta}$	$\sigma_l^{(1)} \sim k^{-2} \times$ \times (осциллирующий множитель) $\sigma_l^{(2)} \sim k^{-2}$

Таблица 2

Реакции, в которых участвуют медленные частицы bY и быстрые частицы aX

	Между b и Y нет кулоновского взаимодействия	b и Y одноименно заряжены	b и Y разноименно заряжены
$Y(b, a)X$	$\sigma_l \sim k_2^{2l-1}$	$\sigma_l \sim k_2^{-2} e^{-2\pi\eta}$	$\sigma_l \sim k_2^{-2}$
$X(a, b)Y$	$\sigma_l \sim k_2^{2l+1}$	$\sigma_l \sim e^{-2\pi\eta}$	$\sigma_l \sim \text{const}$

Все результаты этого и предыдущего параграфов справедливы, если ядерное взаимодействие V достаточно

быстро спадает с расстоянием. Можно показать, что достаточным условием является экспоненциальное спадание

$$V \sim e^{-\alpha r} \quad r \rightarrow \infty$$

со сколь угодно малым параметром α . Везде ниже мы будем считать это условием выполненным, хотя в большинстве случаев оно и является слишком жестким.

До сих пор мы считали частицы b и Y бесспиновыми. Все приведенные выше результаты, однако, определяются исключительно видом радиальных волновых функций и не зависят от спиновых функций. Поэтому все пороговые энергетические зависимости (табл. 1 и 2) непосредственно переносятся на случай частиц со спином.

По поводу пределов применимости всех этих формул можно сказать следующее:

1) при их выводе предполагалось, что величины (типа z в (1.4)), связанные с внутренней областью ($r < R$), не зависят от энергии;

2) для внешних волновых функций использовались их предельные выражения (1.5) и (1.12).

Первое из этих предположений зависит от характера рассматриваемой задачи, и его справедливость должна исследоваться в каждом конкретном случае.

Что касается второго предположения, то здесь можно высказать более определенное суждение:

а) разложения (1.5) справедливы при $kR \ll 1$, т. е. они справедливы в интервале энергий

$$(\Delta E)_a \ll \frac{\hbar^2}{2mR^2}$$

вблизи порога,

б) разложения (1.12) справедливы в интервале

$$(\Delta E)_b \ll \left(\frac{e_1 e_2}{R} \right)^2 / \frac{\hbar^2 l^2}{2mR^2}.$$

Иногда, например, в случае заряженных «странных» частиц оказывается, что

$$(\Delta E)_a \gg (\Delta E)_b.$$

При этом возникает следующая любопытная ситуация: непосредственно вблизи порога ($E_1 \leq (\Delta E)_b$) все энергетические

зависимости имеют «кулоновский» вид. Однако при $(\Delta E)_b < E < (\Delta E)_a$ кулоновским взаимодействием можно пренебречь и сечения следуют законам, характерным для нейтральных частиц.

§ 3. Энергетическая зависимость сечения рассеяния $X(a, a)X$ вблизи порога реакции $X(a, b)Y$; X, a, b, Y — бесспиновые нейтральные частицы

Как мы сейчас увидим, сечение упругого рассеяния имеет весьма специфическую энергетическую зависимость вблизи порога реакции $X(a, b)Y$ (Е. Вигнер, 1948; А. И. Базь, 1957; Г. Брейт, 1957). Четыре возможных типа зависимости изображены на рис. 42. Их изучение позволяет получить много сведений о спинах и четностях частиц X, a, b, Y и о взаимодействии между ними.

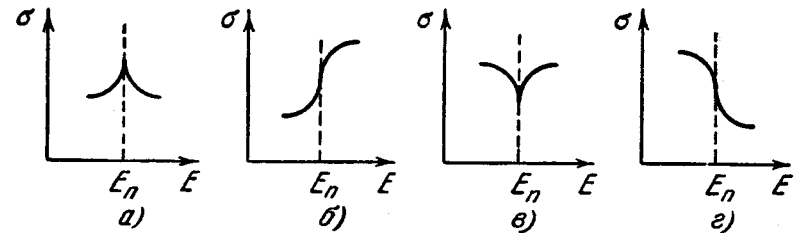


Рис. 42.

Будем считать, что при относительной энергии E частиц X и a , меньшей E_n , возможно только упругое рассеяние $X(a, a)X$, а при $E > E_n$ становится энергетически возможной реакция $X(a, b)Y$, и волновая функция соответственно этому имеет асимптотический вид

$$\left[e^{ik_1 r} + \frac{1}{r} e^{ik_1 r} \sum_l \frac{2l+1}{2ik_1} (S_l - 1) P_l \right] \Phi(a, X) + \frac{e^{ik_2 r}}{2ik_2 r} \sum_l (2l+1) M_l P_l \Phi(b, Y) \sqrt{\frac{v_1}{v_2}}. \quad (3.1)$$

Здесь $\Phi(i, k)$ обозначают внутренние волновые функции пары частиц i и k ; k_1 и k_2 — волновые векторы относительного движения пар a, X и b, Y ; v_1 и v_2 — соответствующие скорости, а P_l — полином Лежандра. Первый

член в (3.1) описывает упругое рассеяние, а последний — реакцию. Матричные элементы рассеяния и реакции S_l и M_l связаны между собой соотношением унитарности

$$|S_l|^2 + |M_l|^2 = 1, \quad (3.2)$$

выражающим закон сохранения числа частиц.

Ниже порога частицы b, Y не могут разойтись на бесконечность из-за недостатка энергии. Последний член в (3.1) в этом случае описывает экспоненциально затухающие «хвосты»: k_2 в этом случае мнимо, $k_2 = i|k_2|$ и $e^{ik_2 r_1} = e^{-|k_2| r_1}$. Закон сохранения числа частиц (т. е. равенство сходящихся и расходящихся потоков) имеет при этом вид

$$|S_l|^2 = 1. \quad (3.2')$$

Как мы видели в предыдущем параграфе, сечение реакции около порога зависит от энергии следующим образом:

$$\sigma_l^{\text{реак}} = \frac{\pi}{k_1^2} (2l+1) |M_l|^2 \sim k_2^{2l+1}$$

и, следовательно, $M_l = m_l k_2^{l+1/2}$, где m_l — некая постоянная. Подставляя эту формулу в (3.2), находим для $E > E_{\text{п}}$

$$|S_l| \approx 1 - \frac{1}{2} |m_l|^2 k_2^{2l+1}, \quad (3.3)$$

т. е.

$$S_l = S_l^{(0)} \left(1 - \frac{1}{2} |m_l|^2 k_2^{2l+1} \right), \quad (3.3')$$

причем $|S_l^{(0)}| = 1$. Матричный элемент S_l является аналитической функцией энергии, и поэтому разложение (3.3') должно быть справедливым и при $E < E_{\text{п}}$, где нет неупругих процессов и где $|S_l| = 1$. Так как ниже порога k_2 мнимо, то с точностью по крайней мере до членов порядка k_2^{2l+1} ниже порога также выполняется равенство $|S_l^{(0)}| = 1$. Таким образом, равенство $|S_l^{(0)}| = 1$ справедливо как выше, так и ниже порога и, следовательно, $S_l^{(0)}$ можно записать как $e^{2i\delta_l^{(0)}}$, где фаза $\delta_l^{(0)}$ действительна как выше, так и ниже порога, т. е. при действительных и

при мнимых k_2 . Это означает, что $\delta_l^{(0)}$ содержит только четные степени k_2 :

$$\delta_l^{(0)}(k_2) = \delta_l^{(0)}(0) + k_2^2 a + \dots$$

Непосредственно вблизи порога ($k_2 R \ll 1$, где R — радиус реакции) можно пренебречь всеми степенями k_2 выше первой и считать, что

$$S_0(k) = e^{2i\delta_0} \left(1 - \frac{1}{2} |m_0|^2 k_2 \right); \quad S_l(k) = e^{2i\delta_l}, \quad (3.4)$$

где через δ_l обозначено значение фазы $\delta_l^{(0)}$ в точке порога. Таким образом, вблизи порога можно все S_l с $l \neq 0$ считать постоянными, тогда как S_0 является здесь линейной функцией k_2 .

Зная энергетическую зависимость величин S_l , можно вычислить и энергетический ход сечения упругого рассеяния вблизи порога:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{уп}}(\theta, E) &= |f(\theta, E)|^2 = \left| f(\theta, E_{\text{п}}) - \frac{1}{4ik_1} e^{2i\delta_0} |m_0|^2 k_2 \right|^2 = \\ &= \sigma_{\text{уп}}(\theta, E_{\text{п}}) - \frac{k_1}{2\pi} \sqrt{\sigma_{\text{уп}}(\theta, E_{\text{п}})} \sigma_{\text{н}}(|k_2|) \times \\ &\quad \times \begin{cases} \sin(2\delta_0 - \alpha) & \text{при } E > E_{\text{п}}, \\ \cos(2\delta_0 - \alpha) & \text{при } E < E_{\text{п}}. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Здесь $\sigma_{\text{уп}}(\theta, E_{\text{п}})$ — дифференциальное сечение упругого рассеяния $X(a, a)X$ в точке порога, $\alpha = \alpha(\theta)$ — фаза амплитуды рассеяния при $E = E_{\text{п}}$:

$$f(\theta, E_{\text{п}}) = e^{i\alpha(\theta)} |f(\theta, E_{\text{п}})|,$$

а $\sigma_{\text{н}}(|k_2|) = \frac{\pi}{k_1^2} |m_0|^2 |k_2|$ совпадает с полным сечением реакции, если $E > E_{\text{п}}$.

Вблизи порога $\sigma_{\text{н}}(|k_2|)$ пропорционально $|k_2|$, а все остальные величины можно считать не зависящими от энергии. Таким образом, $\sigma_{\text{уп}}(\theta, E)$ является вблизи порога линейной функцией $|k_2| \sim \sqrt{|E - E_{\text{п}}|}$; все возможные формы энергетической зависимости изображены на рис. 42.

Отметим важное обстоятельство, с которым мы еще не раз столкнемся: форма сечения упругого рассеяния

вблизи порога содержит очень много информации о свойствах нашей системы.

Действительно, как функция от $|k_2|$ сечение $\sigma_{\text{уп}}$ линейно меняется по обе стороны от порога. Измерив наклоны по обе стороны от порога и зная величину сечения $\sigma(\theta, E_{\text{п}})$ в пороге, можно с помощью (3.5) определить $2\delta_0 - \alpha(\theta)$ и сечение реакции $\sigma_{\text{н}}(|k_2|)$. Так как, кроме того, известна величина

$$|f(\theta, E_{\text{п}})| = \sqrt{\sigma_{\text{уп}}(\theta, E_{\text{п}})},$$

то мы знаем и величину

$$e^{-2i\delta_0} f(\theta, E_{\text{п}}) \equiv e^{-i(2\delta_0 - \alpha)} |f(\theta, E_{\text{п}})|,$$

разложение которой по полиномам Лежандра непосредственно определяет значения всех фаз рассеяния δ_l . Нетрудно убедиться в том, что при этом не возникает никаких неоднозначностей, освободиться от которых при обычной процедуре фазового анализа можно, лишь зная сечение рассеяния при всех энергиях от 0 до ∞ .

Для полного сечения упругого рассеяния (3.5) дает

$$\sigma_{\text{уп}}(E) = \sigma_{\text{уп}}(E_{\text{п}}) - 2\sigma_{\text{н}}(|k_2|) \begin{cases} \sin^2 \delta_0 & \text{при } E > E_{\text{п}}, \\ \frac{1}{2} \sin 2\delta_0 & \text{при } E < E_{\text{п}}, \end{cases} \quad (3.5')$$

т. е. в этом случае возможны лишь два типа энергетической зависимости (типы *a* и *в*) на рис. 42.

Пределы применимости формул (3.5), (3.5') определяются очевидными условиями, вытекающими из приведенного выше вывода: матричный элемент реакции M_0 должен быть пропорционален $k_2^{1/2}$, а его квадрат должен быть мал: $|M_0|^2 \ll 1$. Оба эти условия можно считать выполненными, если $k_2 R \ll 1$, что и определяет область энергий вокруг порога, где применимы (3.5), (3.5'):

$$k_2 \ll \frac{1}{R}, \quad \text{т. е.} \quad \sqrt{|E - E_{\text{п}}|} \ll \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mR^2}}. \quad (3.6)$$

Еще одним условием является отсутствие резонансов промежуточной системы вблизи порога, так как в этом случае резонансная фаза δ_0 будет быстро меняющейся функцией энергии, и разложение, аналогичное (3.5), будет иметь более сложный вид.

§ 4. Физика явлений вблизи порога неупругого канала

Остановимся теперь на физическом смысле полученного нами результата. Формально точка порога является особой точкой (точкой ветвления) уравнения, описывающего свойства нашей системы, так как при $E < E_{\text{п}}$ это уравнение имеет только единственное решение, соответствующее рассеянию $X(a, a)X$, а выше порога ($E > E_{\text{п}}$) имеются уже два независимых решения соответственно двум возможным условиям на бесконечности: 1) сталкиваются частицы *a*, *X* и 2) сталкиваются частицы *b*, *Y*. Ясно поэтому, что в самой точке порога волновая функция системы должна иметь какую-то особенность. В физическом характере этой особенности легко разобраться, рассматривая асимптотическое выражение для волновой функции (3.1). Оно состоит из двух частей, описывающих пары частиц *a*, *X* и *b*, *Y*. Ниже порога частицы *b*, *Y*, образовавшиеся при столкновении *a*, *X*, не могут уйти друг от друга из-за недостатка энергии. Вне области реакции их плотность убывает экспоненциально и равна

$$|M_0|^2 |\varphi_{b,Y}|^2 dr \approx e^{-2|k_2|r_1} |m_0|^2 \left(\frac{m_{b,Y}}{\hbar}\right) dr_1. \quad (4.1)$$

При приближении к порогу $k_2 \rightarrow 0$, и «облако» из частиц *b*, *Y*, пространственное распределение которых пропорционально $e^{-2|k_2|r_1}$, расплывается на все большее расстояние от области реакции. Другими словами, радиус промежуточного состояния, образовавшегося при столкновении *a*, *X*, и относительное число частиц *b*, *Y* в нем при приближении к порогу безгранично растут. Соответственно растет и время жизни промежуточного состояния.

При прохождении через точку порога экспоненциальные хвосты $e^{-|k_2|r_1}$ превращаются в расходящиеся ($e^{ik_2r_1}$) волны частиц *b*, *Y*, что соответствует возможности существования свободных частиц *b*, *Y* при $E > E_{\text{п}}$.

Таким образом, непосредственной причиной пороговых аномалий надо считать безграничное «разбухание» промежуточной системы при приближении к порогу снизу.

Этот качественный вывод можно подтвердить прямым расчетом (А. И. Базь, 1967) по формуле (7.8) гл. VIII для времени T_{11} , проводимого нашей системой в сфере радиуса $r = R_1$, где R_1 больше, чем радиус взаимодействия между частицами.

Матрицу рассеяния запишем как

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \alpha e^{2i\delta_1} & i\beta e^{i(\delta_1+\delta_2)} \\ i\beta e^{i(\delta_1+\delta_2)} & \alpha e^{2i\delta_2} \end{pmatrix}.$$

Из предыдущего анализа мы знаем, что при $E > E_n$

$$\alpha = (1 - \gamma k_2), \quad \beta = (2\gamma k_2)^{1/2}, \quad \delta_2 = \nu k_2, \quad \delta_1 = \delta_{10},$$

при $E < E_n$

$$\alpha = 1, \quad \delta_1 = \delta_{10} - \frac{1}{2}\gamma |k_2|, \quad \delta_2 = i\nu |k_2|, \quad \beta^2 = i2\gamma |k_2|,$$

где δ_{10} , $\gamma = \frac{1}{2}|m_0|^2$ и ν — постоянные.

Подставляя эти величины в (7.8) гл. VIII, находим, что ниже порога

$$T_{11}(R_1, E) - \frac{2R_1}{v_1} = \left\{ \frac{\gamma}{\hbar |v_2|} (1 - e^{-2|k_2|(R_1+\nu)}) - \frac{1}{k_1 v_1} \sin 2(k_1 R_1 + \delta_1) \right\}. \quad (4.2)$$

Единственными быстро меняющимися функциями энергии в этой формуле являются $|v_2|$ и $|k_2|$. Поэтому энергетическая зависимость $T_{11}(R_1, E)$ ниже порога целиком определяется первым членом в (4.2). При фиксированном R_1 этот член монотонно растет с приближением к порогу. Качественный характер зависимости T_{11} от энергии изображен на рис. 43. Максимального значения T_{11} достигает в точке порога.

Формула (4.2) дает время $T_{11}(R_1, E)$, проводимое системой внутри сферы $r = R_1$. Но мы уже видели выше, что радиус промежуточной системы безгранично растет (как $1/|k_2|$ при приближении к порогу снизу). Поэтому $T_{11}(R_1, E)$ меньше истинного времени жизни промежуточного состояния, так как часть времени промежуточная система обладает радиусом, большим чем R_1 .

Чтобы понять, как зависит истинное время жизни от энергии, надо взять $R_1 \gg 1/|k_2|$. В этом случае при изменении энергии на ΔE время, проводимое системой внутри сферы $r = R_1$, изменяется на

$$(T_{11}(R_1, E + \Delta E) - T_{11}(R_1, E)) \xrightarrow{R_1 \rightarrow \infty} \gamma \left(\frac{1}{|v_2'|} - \frac{1}{|v_2|} \right), \quad (4.3)$$

где $|v_2'|$ — абсолютная величина скорости, соответствующая энергии $E + \Delta E$. Очевидно, что формула (4.3) дает

Исправления к стр. 397

Рисунки 43 и 44 должны иметь вид

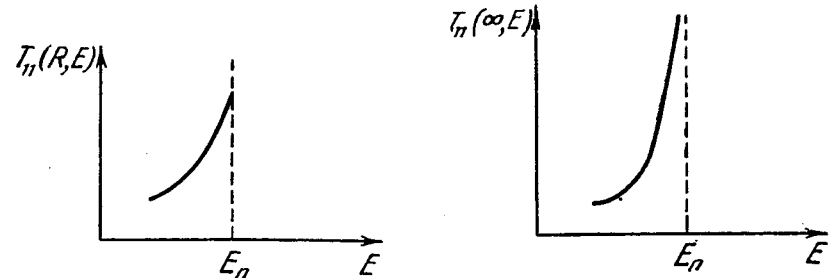


Рис. 43.

Рис. 44.

В предыдущих параграфах уже говорилось, что изучение формы пороговых аномалий в сечениях позволяет получить много информации о свойствах системы. Особенно ярко это проявляется в случае частиц со спином.

Рассмотрим два наиболее важных случая, которые помогут нам увидеть все характерные особенности, возникающие в случае частиц со спином (А. И. Базь, 1957; А. И. Базь, Л. Д. Пузиков, Я. А. Смородинский, 1962).

Пусть a и X — бесспиновые частицы, спин Y равен s , а спин b — половине. При этом возможны два случая:

а) $P(a)P(X) = P(b)P(Y)$ ($P(i)$ — четность частицы i). Вблизи порога b и Y образуются в состоянии с орбитальным моментом $l = 0$, т. е. с полным моментом $j = s \pm 1/2$. Поскольку предполагается, что четности начальных и конечных частиц одинаковы, реакция $X(a, b)Y$ возможна, только если $a + X$ имеют четный орбитальный момент l_1 , равный либо $s + 1/2$, либо $s - 1/2$ (в зависимости от того, какое из этих чисел четно). Соответственно этому условие (3.2) будет теперь связывать M_0 не с S_0 , а с S_{l_1} , и вместо (3.4) мы получим

$$S_{l_1} = e^{2i\delta_{l_1}} \left(1 - \frac{1}{2} |m_0|^2 k_2\right); \quad S_l = e^{2i\delta_l} \quad (l \neq l_1).$$

Сечение рассеяния имеет теперь следующий вид:

$$\sigma_{\text{уп}}(\theta, E) = \sigma_{\text{уп}}(\theta, E_{\text{п}}) - \frac{k_1}{2\pi} \sqrt{\sigma_{\text{уп}}(\theta, E_{\text{п}})} \sigma_{\text{н}}(|k_2|) (2l_1 + 1) \times \\ \times P_{l_1}(\cos \theta) \begin{cases} \sin(2\delta_{l_1} - \alpha) & \text{при } E > E_{\text{п}}, \\ \cos(2\delta_{l_1} - \alpha) & \text{при } E < E_{\text{п}}, \end{cases} \quad (5.1)$$

и мы видим, что аномалия в сечении, описываемая вторым членом в этой формуле, исчезает при тех углах, где $P_{l_1} = 0$. Это позволяет найти величину l_1 и тем самым найти спин частицы Y .

б) Случай $P(a)P(X) = -P(b)P(Y)$ отличается от рассмотренного только тем, что значение l_1 теперь нечетно. Так как $P_{2n+1}(\cos \frac{\pi}{2}) = 0$, а $P_{2n}(\cos \frac{\pi}{2}) \neq 0$, факт исчезновения пороговой аномалии при $\theta = \frac{\pi}{2}$ (в системе ц. м.) сразу же позволит сказать, что четности начальных и конечных частиц разные, а если пороговая аномалия под этим углом не пропадает, то четности одинаковы.

Изучение пороговой аномалии, как видно из (5.1), позволяет получить много сведений:

- 1) отношение наклонов кривой сечения до и после порога определяет величину $(2\delta_{l_1} - \alpha(\theta))$;
- 2) угловое распределение дает модуль амплитуды рассеяния $|f(\theta, E_{\text{п}})|$;
- 3) угловое распределение аномального члена в (5.1)

после этого позволяет найти величину l_1 , а затем найти все фазы упругого рассеяния;

4) абсолютная величина аномалии дает величину полного сечения реакции $\sigma_{\text{н}}$;

5) четность и величина l_1 дают сведения об относительной четности пар a, X и b, Y и определяют величину спина частицы Y . Особенно перспективен такой метод определения четности в физике «странных» частиц.

Таким образом, подробное изучение сечения упругого рассеяния вблизи порога не только сильно облегчает задачу фазового анализа и делает ее однозначной, но и дает массу сведений о неупругом канале.

Если бы спин частицы b был равен не $1/2$, а какому-то j , то, как легко видеть, единственным усложнением явилось бы то, что аномальный член в (5.1) пришлось бы заменить суммой таких же членов, соответствующих всем значениям l_1 , допустимым законами сохранения момента и четности. Это усложнило бы анализ, но не уменьшило количество получаемых из опыта по рассеянию сведений.

Другим случаем, который мы рассмотрим, является случай, когда спины есть и у падающих частиц. Пусть, к примеру, спин a равен $1/2$, спин X равен нулю, а относительно b и Y будем, как и выше, считать, что их спины равны $1/2$ и s .

Отличный от нуля спин a вносит существенные усложнения в формулы, так как теперь для обоих значений полного момента $j = s \pm 1/2$ рождающихся частиц можно найти два значения l_1 и l_2 орбитальных моментов пары a, X нужной четности, таких, что соответствующие моменты $j_1 = l_1 \pm 1/2$ и $j_2 = l_2 \pm 1/2$ равны $s + 1/2$ и $s - 1/2$ соответственно. Таким образом, реакция может идти через оба орбитальных состояния и, следовательно, описывается двумя матричными элементами $M_{s+1/2} \equiv M'$, $M_{s-1/2} \equiv M''$. Линейная зависимость от k_2 около порога возникает поэтому в двух орбитальных состояниях:

$$\left. \begin{aligned} S_{l_1}^{s+1/2} &= e^{2i\delta_{l_1}^{s+1/2}} \left(1 - \frac{k_2}{2} |m'|^2\right); \\ S_{l_1}^{s-1/2} &= e^{2i\delta_{l_1}^{s-1/2}} \left(1 - \frac{k_2}{2} |m''|^2\right). \end{aligned} \right\} \quad (5.2)$$

Теперь уже по известным формулам легко вычислить сечение и поляризацию частиц a , X :

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{\text{уп}}(\theta, E) &= |g(\theta, E)|^2 + |h(\theta, E)|^2, \\ \mathcal{P}(\theta, E) &= 2 \operatorname{Im} [h(\theta, E) g^*(\theta, E)] / \sigma_{\text{уп}}(\theta, E), \\ g(\theta, E) &= \frac{1}{2ik_1} \sum_l [(l+1)(S_l^{l+1/2} - 1) + \\ &\quad + l(S_l^{l-1/2} - 1)] P_l, \\ h(\theta, E) &= \frac{1}{2ik_1} \sum_l [S_l^{l-1/2} - S_l^{l+1/2}] P_l^{(1)}. \end{aligned} \right\} \quad (5.3)$$

Если, например, внутренняя четность частиц до и после реакции одинакова и если s нечетное, все S_l^j вблизи порога можно считать постоянными, кроме

$$\begin{aligned} S_{l_1}^{l_1-1/2} &= e^{2i\delta_{l_1}^{l_1-1/2}} \left(1 - \frac{k_2}{2} |m'|^2\right), \quad l_1 = s+1, \\ S_{l_2}^{l_2+1/2} &= e^{2i\delta_{l_2}^{l_2+1/2}} \left(1 - \frac{k_2}{2} |m''|^2\right), \quad l_2 = s-1, \end{aligned}$$

и из (5.3) получаем

$$\begin{aligned} g(\theta, E) &= g(\theta, E_{\text{п}}) + \\ &\quad + \frac{ik_2}{k_1} \left[|m'|^2 l_1 e^{2i\delta_{l_1}^{l_1-1/2}} P_{l_1} + |m''|^2 (l_2+1) e^{2i\delta_{l_2}^{l_2+1/2}} P_{l_2} \right], \\ h(\theta, E) &= \\ &= h(\theta, E_{\text{п}}) - \frac{ik_2}{k_1} \left[|m'|^2 e^{2i\delta_{l_1}^{l_1-1/2}} P_{l_1}^{(1)} + |m''|^2 e^{2i\delta_{l_2}^{l_2+1/2}} P_{l_2}^{(1)} \right], \end{aligned} \quad (5.4)$$

где, как и раньше, k_1 и k_2 — волновые векторы относительного движения частиц aX и bY соответственно, а $P_l^{(1)}$ — присоединенный полином Лежандра. Подставляя (5.4) в (5.3), легко получить энергетическую зависимость сечения и поляризации. При этом получается уже знакомый результат, что и сечение рассеяния, и поляризация имеют особенности в точке порога. Обе величины являются линейными функциями $|k_2|$ вблизи по-

рога, и поэтому опыты при данном угле θ позволяют определить шесть величин: $\sigma_{\text{уп}}(\theta, E_{\text{п}})$, $\mathcal{P}(\theta, E_{\text{п}})$ и наклоны σ и \mathcal{P} по обе стороны от порога. Анализ экспериментальных данных при этом не так уж прост, но из него, тем не менее, по-прежнему можно определить четность и спин частицы Y , получить значения сечений $\sigma_{\text{н}}^{s \pm 1/2}$ и, кроме того, вычислить фазы упругого рассеяния δ_l^j .

Ответ на вопрос, почему опыты вблизи порога дают такую богатую информацию, заключается в том, что вблизи порога вместо какой-либо одной величины (сечение, поляризация, ...) измеряются три: сама эта величина и ее производные по $|k_2|$ по обе стороны от порога, выражающиеся через фазы рассеяния в точке порога. Таким образом, вблизи порога эксперимент дает втрое больше уравнений для определения неизвестных, чем обычно.

Пусть, например, частица a (спин $1/2$) рассеивается на X (спин 0). Если в рассматриваемой области энергий все неупругие каналы закрыты, то, как хорошо известно, для проведения фазового анализа необходимо измерить под всеми углами сечение рассеяния и поляризацию частиц a . Если же какие-то из неупругих каналов открыты, то фазовый анализ возможен, только если, кроме упругого канала, изучены и все открытые при этой энергии неупругие каналы. И даже в этом случае фазовый анализ оказывается неоднозначным. Положение существенно облегчается, если изучить область вблизи какого-то порога.

Пусть это первый порог, т. е. при $E < E_{\text{п}}$ возможно только упругое рассеяние. Измерив сечение до и выше точки порога, мы получим три уравнения для фаз рассеяния. Таким образом, измерение поляризации оказывается излишним, так как из трех уравнений, полученных при измерении σ , можно получить все фазы δ_l^j и по ним уже вычислить поляризацию (при обычном методе мы имеем два уравнения для фаз: измеренные значения σ и \mathcal{P}). В более сложном случае, когда имеется несколько неупругих каналов и фазы рассеяния комплексны, измерение сечения и поляризации вблизи пороговой области позволяет определить эти фазы, не изучая наряду с упругим и все другие открытые каналы.

Таким образом, области вблизи порога являются выделенными и в том смысле, что сравнительно простыми средствами в этих областях можно получить очень много информации.

§ 6. Обобщение на случай многих каналов

Во всех рассмотренных выше случаях мы считали, что имеются лишь два связанных друг с другом канала (a, X и b, Y). На практике, однако, часто приходится встречаться с проблемой большого числа каналов. Примером тому может служить большинство ядерных реакций, а также реакции между странными частицами. Мы поэтому сейчас рассмотрим общий случай многоканальной системы (А. И. Базь, Л. Б. Окунь, 1958). Пусть имеется $N + 1$ пара частиц a_i, X_i ($i = 1, 2, \dots, (N + 1)$), могущих переходить друг в друга:

$$a_i + X_i \rightleftharpoons a_j + X_j.$$

Будем считать, что каналы пронумерованы по величине их пороговой энергии E_i (т. е. наиболее низкой энергией покоя обладает канал a_1, X_1 ; при повышении энергии открывается канал a_2, X_2 и т. д.). Свойства такой системы описываются $(N + 1)$ -рядной матрицей рассеяния S_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, N + 1$).

Изучим энергетическую зависимость элементов матрицы рассеяния в области вблизи порога $(N + 1)$ -го канала. Сечение процесса $i \rightarrow j$ равно $\sigma_{ij} = \frac{\pi}{k_i^2} |S_{ij} - \delta_{ij}|^2$,

где k_i — волновой вектор в i -м канале (мы предполагаем для простоты, что все частицы — нейтральные бесспиновые и рассматриваем лишь случай нулевого орбитального момента. Обобщение на спины и орбитальные моменты тривиально, хотя и громоздко). Вблизи $(N + 1)$ -го порога все $S_{l(N+1)}$ имеют вид $S_{l(N+1)} = m_l k^{1/2}$; $S_{N+1, N+1} = 1$, где m_l — постоянные, а $k \equiv k_{N+1}$.

Закон сохранения числа частиц приводит к унитарности S -матрицы, т. е. между ее элементами существуют соотношения

$$\sum_{k=1}^{N+1} S_{ik} S_{lk}^* = \delta_{il}, \quad (6.1)$$

где немой индекс пробегает все открытые каналы. Обратимость времени обуславливает симметрию S -матрицы:

$$S_{ik} = S_{ki}. \quad (6.2)$$

Пользуясь этими общими свойствами и известным видом $S_{l(N+1)}$, найдем энергетическую зависимость всех элементов S_{ij} вблизи порога $(N + 1)$ -го канала. Разложим все S_{ij} с $i, j \neq N + 1$ по степеням k (ограничимся двумя первыми членами):

$$S_{ij} = S_{ij}^{(0)} + a_{ij}k. \quad (6.3)$$

Так как все S_{ij} являются аналитическими функциями, это разложение справедливо как выше, так и ниже $(N + 1)$ -го порога. Ниже порога открыто N каналов, k мнимо ($k = i|k|$) и условие унитарности имеет вид

$$\sum_{l=1}^N (S_{il}^{(0)} + a_{il}i|k|)(S_{ml}^{(0)*} - a_{ml}^*i|k|) = \delta_{im}. \quad (6.4)$$

В точке порога ($k = 0$) оно сводится к

$$\sum_{l=1}^N S_{il}^{(0)} S_{ml}^{(0)*} = \delta_{im}. \quad (6.5)$$

Выше порога ($k = |k|$) необходимо учитывать новый открытый канал и условие унитарности имеет вид

$$\sum_{l=1}^N (S_{il}^{(0)} + a_{il}k)(S_{ml}^{(0)*} + a_{ml}^*k) + m_l m_m^* k = \delta_{im}. \quad (6.6)$$

Из всех этих равенств элементарно получаются следующие выражения для коэффициентов a_{ij} :

$$a_{ij} = -\frac{1}{2} m_i m_j. \quad (6.7)$$

Эта формула и решает задачу, поставленную в начале этого параграфа. Действительно, она позволяет найти энергетическую зависимость всех сечений σ_{ij} вблизи порога $(N + 1)$ -го канала (напоминаем, что мы

для простоты выкладок ограничиваемся случаем нулевого орбитального момента):

$$\sigma_{ij} = \frac{\pi}{k_i^2} |S_{ij} - \delta_{ij}|^2 = \sigma_{ij}(E_{N+1}) + \frac{\pi}{k_i^2} \operatorname{Re} [(\delta_{ij} - S_{ij}^{(0)*}) m_i m_j k] =$$

$$= \sigma_{ij}(E_{N+1}) + \frac{\pi}{k_i^2} |k| \begin{cases} \operatorname{Re} [(\delta_{ij} - S_{ij}^{(0)*}) m_i m_j] & \text{при } E > E_{N+1}, \\ -\operatorname{Im} [(\delta_{ij} - S_{ij}^{(0)*}) m_i m_j] & \text{при } E < E_{N+1}. \end{cases} \quad (6.8)$$

m_i и m_j с точностью до фазовых множителей пропорциональны корням квадратным из $\sigma_{i(N+1)} k^{-1}$ и $\sigma_{j(N+1)} k^{-1}$ соответственно.

Таким образом, пороговая аномалия в процессе $i \rightarrow j$ тем больше, чем больше сечения и, следовательно, чем сильнее взаимодействия $i \rightarrow (N+1)$ и $j \rightarrow (N+1)$. Это открывает богатую возможность исследования взаимодействия между какой-либо парой частиц по энергетическим зависимостям реакций между другими частицами.

Основной итог можно сформулировать следующим образом. В точке порога сечения всех процессов $i \rightarrow j$ имеют особенности типа, изображенного на рис. 42. Изучение этих особенностей сулит получение богатой информации.

§ 7. Форма особенностей вблизи порога рождения заряженных частиц

Мы видели выше, что величина пороговых особенностей в сечении упругого рассеяния $X(a, a)X$ тем больше, чем больше сечение порогового процесса $X(a, b)Y$. Именно поэтому вклад в образование особенностей вблизи порога рождения незаряженных частиц дает лишь канал рождения b, Y в состоянии с $l = 0$, ибо при $l \neq 0$ рождение подавлено, так как, чтобы вылететь из области реакции, b и Y должны проникнуть сквозь центробежный барьер.

В случае одноименно заряженных частиц b и Y сечения их рождения вблизи порога из-за существования

кулоновского барьера мало даже в канале с $l = 0$. Никаких пороговых особенностей в упругом сечении возникнуть в этом случае не может.

Положение существенно меняется, если b и Y — разнородно заряженные частицы, и этот случай требует специального рассмотрения (А. И. Базь, 1959). Подход, изложенный в § 3, оказывается здесь неприменимым, так как, если точка порога $E = E_{\text{п}}$ в случае нейтральных b и Y является простой точкой ветвления, и разложение для S , полученное выше порога, остается справедливым и ниже порога, то в случае заряженных b и Y это уже не так. Точка $E_{\text{п}}$ является теперь существенно особой точкой, так как в кулоновском поле имеется бесконечное количество связанных состояний, сгущающихся в точке $E_{\text{п}}$. Разложения всех физических величин выше и ниже порога имеют теперь совершенно различный вид. Поэтому требуется более детальное рассмотрение проблемы. В соответствии с этим приходится делать ряд предположений о свойствах нашей системы, так как одного закона сохранения числа частиц оказывается недостаточно.

Мы будем предполагать ниже, что все взаимодействия между частицами (кроме кулоновского) равны нулю вне некоего радиуса R , о котором везде ниже будет говориться как о радиусе реакции. Одного этого предположения оказывается достаточно для установления вида пороговых особенностей.

Как известно из общей теории реакций, волновая функция, соответствующая процессу

$$a + X \begin{cases} \leftarrow a + X \\ \searrow b + Y, \end{cases}$$

имеет вне радиуса реакции вид (мы ограничимся пока рассмотрением лишь одного парциального состояния, в соответствии с чем ниже выписана лишь радиальная часть):

$$\Psi = [\psi^{(-)} - S_{aa}\psi^{(+)}] \Phi(a, X) - S_{ab}\psi^{(+)} \Phi(b, Y), \quad (7.1)$$

$\psi^{(\pm)}$ — это радиальные функции частиц $a + X$, имеющие асимптотический вид $\sim \frac{1}{\sqrt{v_a}} e^{\pm ik_a r}$, $\psi^{(+)}$ — радиальная

функция частиц $b + Y$:

$$\varphi^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{v_b}} (G + iF);$$

S_{aa} и S_{ab} — элементы матрицы рассеяния.

Из предыдущей главы мы знаем, что в случае двухканальной системы элементы матрицы рассеяния зависят от взаимодействия в области реакции ($r < R$) только через посредство трех действительных параметров. С их помощью нужные нам элементы S -матрицы можно представить в виде (см. примечание к стр. 377):

$$\left. \begin{aligned} S_{aa} &= \frac{\psi^{(-)} (1 - R_{aa}\tau_a^*) (1 - R_{bb}\tau) - R_{ab}^2 \tau_a^* \tau}{\psi^{(+)} (1 - R_{aa}\tau_a) (1 - R_{bb}\tau) - R_{ab}^2 \tau_a \tau}, \\ S_{ab} &= \frac{2iR}{\psi^{(+)} \varphi^{(+)} \cdot (1 - R_{aa}\tau_a) (1 - R_{bb}\tau) - R_{ab}^2 \tau_a \tau} \cdot R_{ab} \end{aligned} \right\} (7.2)$$

Здесь $\tau_a = \frac{\psi^{(+)'}}{\psi^{(+)}} \Big|_{r=R}$, $\tau = \frac{\varphi^{(+)'}}{\varphi^{(+)}} \Big|_{r=R}$ — логарифмические производные волновых функций на радиусе реакции, k — волновой вектор пары $b + Y$, R_{ik} — «внутренние» постоянные (элементы R -матрицы), которые определяются характером взаимодействия при $r \leq R$; R_{ik} , $\psi^{(\pm)}$ и τ_a можно считать практически постоянными, тогда как $\varphi^{(+)}$ и τ здесь очень сильно зависят от энергии (точка E_{Π} является обычной, ничем не выделенной для R_{ik} , $\psi^{(\pm)}$ и τ_a , тогда как для $\varphi^{(+)}$ и τ эта точка является существенно особой). Поэтому мы перепишем (7.2) в виде

$$S_{aa} = e^{2i\delta} \frac{1 - \tau/\Delta^*}{1 - \tau/\Delta}, \quad S_{ab} = \frac{1}{\varphi^{(+)}} \frac{C}{\Delta - \tau}, \quad (7.2')$$

где все медленно меняющиеся величины собраны в постоянные δ , C и Δ и ясно видна зависимость от «быстрых» величин τ и $\varphi^{(+)}$. Величины S_{ab} и S_{aa} удовлетворяют, конечно, условию унитарности, которое при такой записи сводится к действительности δ и к соотношению $\text{Im} \Delta = - \left| \frac{C}{2} \right|^2$.

Чтобы найти вид энергетической зависимости упругого сечения, надо знать логарифмическую производную τ выше и ниже порога. Для ее вычисления нельзя пользоваться формулами (1.12), так как они справедливы лишь выше порога, когда $k > 0$. Вместо этого надо воспользоваться общим выражением для кулоновской функции, которое остается справедливым и ниже порога. Это выражение имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi_{kl}^{(+)}(r) &= \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\pi\eta - \frac{\pi\eta}{2} - i \frac{l\pi}{2}} \sqrt{\Gamma(l+1+i\eta) \Gamma(l+1-i\eta)} \times \\ &\times \frac{1}{\Gamma(2l+2)} \left(- \frac{\sin \pi(l+1+i\eta)}{\pi} \right) e^{ikr} z^{l+1} \times \\ &\times \left\{ \ln z \sum_{s=0}^{\infty} \frac{z^s}{\Gamma(s+1)} \frac{\Gamma(q+s) \Gamma(p)}{\Gamma(q) \Gamma(p+s)} + \right. \\ &+ \sum_{s=0}^{\infty} z^s \frac{\Gamma(p) \Gamma(q+s)}{\Gamma(p+s) \Gamma(s+1) \Gamma(q)} \cdot [\psi(q+s) - \psi(p+s) - \psi'(s+1)] + \\ &\left. + \sum_{s=1}^{p-1} (-1)^{s+1} \frac{1}{z^s} \frac{\Gamma(s) \Gamma(q-s) \Gamma(p)}{\Gamma(q) \Gamma(p-s)} \right\}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Здесь $z = -2kr$; $q = l+1+i\eta$; $p = 2l+2$, Γ — это Γ -функция, а ψ — ее логарифмическая производная. Выше порога ($k > 0$) функция $\varphi_{kl}^{(+)}$ превращается в

$$\frac{1}{\sqrt{v}} (G_{kl} + iF_{kl}).$$

При $|k| \rightarrow 0$, $r \rightarrow \text{const}$ из (7.3) можно получить следующее приближенное выражение для τ :

$$\tau_{kl} \approx \frac{l+1}{r} \left\{ 1 - \frac{2l+1}{l+1} \frac{1}{1+\xi l} \right\}, \quad (7.4)$$

где ξ — не зависящая от энергии постоянная,

$$\xi = \frac{\pi(2k\eta)^{2l+1}}{(2l+1)\Gamma^2(2l+1)}, \quad (7.4')$$

а

$$t = \frac{1}{\pi} [\ln(-2ikr) + \psi(l+1+i\eta) - \ln|2k\eta r|].$$

В случае разноименно заряженных частиц $\eta = \frac{e_1 e_2}{\hbar v} < 0$ выше порога; ниже порога, где $v = |v|$, $i\eta < 0$. Пользуясь тем, что при больших значениях аргумента ψ -функция ведет себя как

$$\psi(i\omega) \sim \ln \omega$$

при неотрицательных ω и как

$$\psi(\omega) \sim \ln(-\omega) - \pi \operatorname{ctg} \pi \omega$$

для действительных отрицательных ω , получаем

$$t \sim \begin{cases} i & \text{при } E > E_n, \\ (-1)^l \operatorname{ctg} i\pi\eta & \text{при } E < E_n. \end{cases} \quad (7.5)$$

Выше порога t — постоянная, а ниже порога бесконечное количество раз обращается в бесконечность:

$$(-1)^l \operatorname{ctg} i\pi\eta = (-1)^{l+1} \operatorname{ctg} \pi \sqrt{\frac{e_1^2 e_2^2 m}{2\hbar^2 (E_n - E)}}.$$

Энергии E_n , при которых ctg обращается в бесконечность, определяются условием

$$E_n - E_n = \frac{1}{n^2} \frac{e_1^2 e_2^2 m}{2\hbar}, \quad (7.6)$$

где n — любое целое число. Эта формула совпадает с формулой для энергии кулоновских связанных состояний пары $b + Y$, которые существовали бы, если бы между b и Y не действовали никакие силы, кроме кулоновских.

Рассмотрим теперь поведение упругого сечения. Элемент S -матрицы S_{aa} можем записать как

$$S_{aa} = \frac{\alpha + \beta \zeta t}{\alpha^* + \beta^* \zeta t} = S_l,$$

где $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ и $\beta = \beta_1 + i\beta_2$ — комплексные постоянные, скомбинированные очевидным образом из постоянных Δ и δ в (7.2') и постоянных, входящих в формулу для τ (7.4).

Выше порога $t = i$ и сечение рассеяния $X(a, a)X$ равно

$$\sigma_s = \frac{\pi}{k_a^2} (2l + 1) |S_l - 1|^2 = \frac{\pi}{k_a^2} (2l + 1) \left| \frac{\alpha + i\zeta\beta}{\alpha^* + i\zeta\beta^*} - 1 \right|^2. \quad (7.7)$$

Сечение реакции $X(a, b)Y$

$$\sigma_r = \frac{\pi}{k_a^2} (2l + 1) (1 - |S_l|^2) = \frac{\pi}{k_a^2} (2l + 1) \left\{ 1 - \left| \frac{\alpha + i\zeta\beta}{\alpha^* + i\zeta\beta^*} \right|^2 \right\}. \quad (7.8)$$

Оба сечения не зависят от энергии, так как k_a — волновой вектор частиц $a + X$ — можно считать постоянным в области вокруг порога.

Ниже порога возможно только упругое рассеяние. Его сечение имеет бесконечное количество резонансов, которые сгущаются по мере приближения к точке порога:

$$\begin{aligned} \sigma_s &= \frac{\pi}{k_a^2} (2l + 1) |S_l - 1|^2 = \frac{2\pi}{k_a^2} (2l + 1) (1 - \operatorname{Re} S_l) = \\ &= \frac{4\pi}{k_a^2} (2l + 1) \sin^2 \delta_l, \\ \delta_l &= \arctg \frac{\alpha_2 + \beta_2 (-1)^{l+1} \zeta \operatorname{ctg} \pi \sqrt{\frac{e_1^2 e_2^2 m}{2\hbar^2 |E - E_n|}}}{\alpha_1 + \beta_1 (-1)^{l+1} \zeta \operatorname{ctg} \pi \sqrt{\frac{e_1^2 e_2^2 m}{2\hbar^2 |E - E_n|}}}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Физическая причина появления резонансов заключается в следующем. Если бы частицы $b + Y$ не были связаны с каналом $a + X$ и между ними действовали бы только кулоновские силы, то при энергиях, определяемых условием (7.6), существовали бы связанные состояния пары $b + Y$. Связь с каналом $a + X$ делает эти состояния нестабильными относительно распада на $a + X$.

При этом в сечении $X(a, a)X$ возникают резонансы, соответствующие этим квазистационарным состояниям.

Положение резонансов определяется условием $\delta = n\pi + \frac{\pi}{2}$, откуда следует:

$$\operatorname{ctg} \pi \sqrt{\frac{e_1^2 e_2^2 m}{2\hbar^2 (E_n - E_r)}} = (-1)^l \frac{1}{\xi} \frac{\alpha_1}{\beta_1}. \quad (7.10)$$

Это условие не совпадает с (7.6), т. е. резонансы оказываются несколько сдвинутыми относительно положений водородоподобных уровней (7.6). Это и должно происходить, так как между b и Y действуют не только кулоновские силы.

Вычисленная из (7.10) плотность уровней $\rho(E)$ (число резонансов на единичный интервал энергии) равна

$$\rho(E) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e_1^2 e_2^2 m}{2\hbar^2}} \frac{1}{(E_n - E)^{3/2}}; \quad (7.11)$$

она возрастает по мере приближения к порогу. С другой стороны, усредненное по некоторому интервалу $2\Delta E$ сечение

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_s &= \frac{1}{2\Delta E} \int_{E-\Delta E}^{E+\Delta E} dE \sigma_s(E) = \\ &= \frac{2\pi}{k_a^2} (2l+1) \operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{1+y^2} \left[1 - \frac{\alpha + \beta \zeta y}{\alpha^* + \beta^* \zeta y} \right] \right\} = \\ &= \frac{2\pi}{k_a^2} (2l+1) \left[1 - \operatorname{Re} \frac{\alpha + i\beta \zeta}{\alpha^* + i\beta^* \zeta} \right] \end{aligned} \quad (7.12)$$

оказывается не зависящим от энергии. Это означает, что ширина уровней по мере приближения к порогу уменьшается как $(E_n - E)^{3/2}$. При интегрировании в (7.12) надо учесть, что при $|S_l| < 1$, $i(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta) > 0$.

Любопытно отметить, что усредненное по энергии сечение обладает свойством непрерывности: сравнение (7.12) с (7.7), (7.8) показывает, что $\bar{\sigma}_s = \sigma_t$, где $\sigma_t = \sigma_s + \sigma_r$ — полное сечение выше порога*). Качественно

*) Это естественно, поскольку высоковозбужденные состояния в кулоновском поле подобны состояниям непрерывного спектра при малой положительной энергии. Свойства таких состояний подробно рассмотрены в Приложении Б.

но поведение сечений вблизи порога изображено на рис. 45.

Заметим, что с увеличением l ширина уровней уменьшается, а положения резонансов приближаются к значениям, даваемым формулой (7.6) для чисто кулоновских уровней. Физическая причина этого в том, что при $l \gg 1$ вероятность найти частицы близко друг к другу мала, а стало быть, мала и вероятность перехода $b + Y \rightarrow a + X$. Таким образом, время жизни квазистационарных состояний с ростом l растет, и это приводит к уменьшению ширины. Количественные оценки можно получить из (7.9), (7.10), заметив, что с ростом l постоянная ζ быстро стремится к нулю.

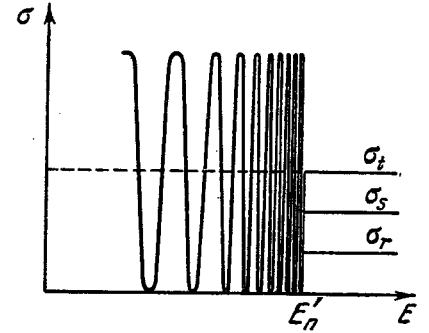


Рис. 45.

Легко оценить величину интервала энергий δE , где сечение рассеяния имеет резонансный характер. Он должен быть по порядку величины равным энергии связи первого кулоновского уровня частиц $b + Y$, т. е.

$$\delta E \approx mc^2 \left(\frac{e_1 e_2}{\hbar c} \right)^2. \quad (7.13)$$

Для «странных» частиц $\delta E \approx 0,1 \text{ Мэв}$, так что все специфически кулоновские эффекты разыгрываются в этом сравнительно очень узком интервале. В то же время условие $kR \ll 1$ остается выполненным в интервале порядка десятков Мэв вокруг порога. Ясно поэтому, что хотя вблизи самого порога доминируют кулоновские эффекты, несколько дальше от порога окажется применимой развитая в предыдущих параграфах теория для нейтральных частиц.

В задачах атомной физики ситуация обратная: область, где $kR \ll 1$, гораздо меньше, чем δE .

Везде выше предполагалось, что рассматриваемая система имеет лишь два открытых канала. Нетрудно

обобщить все полученные выше основные результаты на случай многих каналов. Сделать это можно, заменив формулы для S -матрицы на более общие, выведенные с учетом многоканальности. Формулы эти довольно громоздки, и мы их выписывать не будем. Достаточно сказать лишь, что физическая картина остается без изменений: характер особенностей остается точно таким же, как и в случае двухканальной системы, и они имеются у сечений всех процессов $X_i(a_i, a_j)X_j$, возможных в области порога.

Учет спинов частиц проводится тривиально и также не дает ничего нового.

Изложенная в этом параграфе теория находит особенно частое применение при изучении атомных столкновений вблизи порогов перезарядки типа $A + B \rightarrow A^+ + B^-$ или при изучении атомного фотоэффекта $A + \gamma \rightarrow e^- + A^+$ вблизи порога ионизации. В последнем случае, в частности, наличие сгущающихся к порогу резонансов в сечении уже давно установлено экспериментально.

Другим примером может служить рассеяние μ -мезонов на ядрах вблизи порогов неупругого рассеяния мезона. Опыты с μ^- -мезоном могут оказаться особенно интересными, так как расположение и форма подпороговых резонансов в сечении рассеяния μ^- -мезонов позволит хорошо измерять отклонение потенциала от чисто кулоновского, т. е. измерять форму распределения заряда в ядре.

ГЛАВА X

ЗАДАЧА ТРЕХ ТЕЛ

Задача нескольких тел гораздо богаче по содержанию, чем задача двух тел. Это делает задачу многих тел очень привлекательной, так как она позволяет описать гораздо более широкий круг реальных явлений, которыми приходится заниматься в атомной и ядерной физике и в физике элементарных частиц. Однако за это приходится дорого платить: задачи многих тел оказываются несравненно более трудными для решения, чем задача двух тел. И дело здесь совсем не в том, что из-за большего количества переменных численное решение уравнений требует большой затраты труда. Главная трудность заключается в усложнении аналитической природы решения задачи многих тел по сравнению с задачей двух тел. Причина этого в том, что система многих тел может при одной и той же энергии находиться в нескольких существенно разных состояниях (иногда говорят — имеет несколько каналов). Одним из проявлений этого является то, что возникает физическая неоднозначность решений уравнения Шредингера. Есть и ряд других трудностей.

Все это привело к тому, что разработка методов решения задачи нескольких (более чем двух) тел заняла много лет. Мы не будем перечислять все работы, посвященные задаче нескольких тел. Отметим лишь главные этапы. При этом мы ограничимся простейшим случаем задачи многих тел — задачей трех тел, так как все специфические особенности многотельных задач в ней проявляются достаточно четко. Первая серьезная попытка корректно решить задачу трех тел для частного случая равных масс и точечных взаимодействий между

частицами (см. § 9 гл. IV) была предпринята Г. В. Скорняковым и К. А. Тер-Мартirosяном в 1956 г. Они встретились с целым рядом трудностей, часть из которых им удалось преодолеть, а остальные были разрешены в последующих работах (см., например, Г. С. Данилов, 1961, Р. А. Минлос, Л. Д. Фаддеев, 1961 А, Б).

Полное математическое исследование задачи трех тел было завершено лишь в 1960 г. (Л. Д. Фаддеев, 1960). В частности, было показано, как надо обходить главную трудность многочисленных задач — физическую неоднозначность решений уравнения Шредингера, связанную с существованием нескольких каналов. Задача N тел была рассмотрена методом Фаддеева в работе О. Я. Якубовского (1967).

Ниже излагается квантовая теория рассеяния для задачи трех тел в том сравнительно простом виде, который она приняла в настоящее время. Основное внимание при этом обращается на физические особенности задачи трех тел, а не на математические тонкости. Сначала излагается общая теория. Последние параграфы этой главы посвящены применению общей теории к некоторым упрощенным модельным задачам, имеющим практический интерес.

§ 1. Обозначения

Рассмотрим систему трех нерелятивистских бесспиновых частиц 1, 2, 3 с массами m_1, m_2, m_3 . Потенциал взаимодействия между i -й и j -й частицами обозначим $v_{ij}(r_i - r_j)$. Уравнение Шредингера (у. Ш.) имеет обычный вид:

$$\left\{ -\sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_{r_i}^2 + \sum_{i>j}^3 v_{ij}(r_i - r_j) - E \right\} \Psi(r_1, r_2, r_3) = 0. \quad (1.1)$$

Ниже почти всегда будет удобнее работать в импульсном представлении. При этом везде в этой главе в качестве переменных импульсного представления будут использоваться именно импульсы, а не волновые векторы. Приведем соответствующие формулы перехода

да. Волновая функция в импульсном представлении есть

$$\Psi(k_1, k_2, k_3) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi(r_1, r_2, r_3) e^{-i(k_1 r_1 + k_2 r_2 + k_3 r_3)/\hbar} dr_1 dr_2 dr_3.$$

Эта функция является решением уравнения *)

$$(H_0 + \hat{V}_{12} + \hat{V}_{13} + \hat{V}_{23} - E) \Psi[k_1, k_2, k_3] = 0; \quad (1.2)$$

здесь H_0 — гамильтониан свободного движения:

$$H_0 \Psi(k_1, k_2, k_3) = \left(\frac{k_1^2}{2m_1} + \frac{k_2^2}{2m_2} + \frac{k_3^2}{2m_3} \right) \Psi(k_1, k_2, k_3), \quad (1.3)$$

а взаимодействия $\hat{V}_{12}, \hat{V}_{13}$ и \hat{V}_{23} — это интегральные операторы, действующие на аргументы $(k_1, k_2), (k_1, k_3)$ и (k_2, k_3) соответственно. Например

$$\hat{V}_{12} \Psi[k_1, k_2, k_3] = \int v_{12} \left(\frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_1 + m_2} - \frac{m_2 k'_1 - m_1 k'_2}{m_1 + m_2} \right) \times \\ \times \delta(k_3 - k'_3) \delta(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2) \Psi(k'_1, k'_2, k'_3) dk'_1 dk'_2 dk'_3; \quad (1.4)$$

здесь $v_{12}(k)$ — взаимодействие частиц 1 и 2 в импульсном представлении — равно

$$v_{12}(k) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int v_{12}(r) e^{ikr/\hbar} dr. \quad (1.5)$$

Для отделения движения системы как целого перейдем к новым переменным:

$$K = k_1 + k_2 + k_3, \quad k_{12} = \frac{m_2 k_1 - m_1 k_2}{m_1 + m_2}, \\ p_3 = \frac{m_3(k_1 + k_2) - (m_1 + m_2)k_3}{m_1 + m_2 + m_3}. \quad (1.6)$$

Кроме пары переменных k_{12}, p можно ввести еще две пары векторов k_{13}, p_2 и k_{23}, p_1 , получаемых из (1.6) циклической перестановкой индексов 1, 2, 3.

*) Везде ниже шляпка над символом означает интегральный оператор. Если аргументы функции заключены в квадратные скобки, как в (1.2), то это означает, что это аргументы не самой функции Ψ , а функции, возникающей из Ψ под действием операторов, стоящих слева.

В системе центра инерции (с.ц.и.) волновая функция не зависит от \mathbf{K} . В качестве двух независимых переменных волновой функции может быть выбрана любая пара $(\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{p}_l)$ в зависимости от удобства. Если нам безразлично, какую из пар переменных использовать, мы будем опускать индексы при \mathbf{k}_{ij} и \mathbf{p}_l , например $\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{p})$. Все три пары переменных $(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{p}_3)$, $(\mathbf{k}_{23}, \mathbf{p}_1)$ и $(\mathbf{k}_{31}, \mathbf{p}_2)$ однозначно связаны друг с другом.

В с.ц.и. свободный гамильтониан есть

$$H_0 = H_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \frac{k_{12}^2}{2m_{12}} + \frac{p_3^2}{2n_3} = \frac{k_{23}^2}{2m_{23}} + \frac{p_1^2}{2n_1} = \frac{k_{31}^2}{2m_{31}} + \frac{p_2^2}{2n_2}; \quad (1.7)$$

m_{ij} и n_l — приведенные массы:

$$m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}, \quad n_l = \frac{m_l (m_i + m_j)}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad l \neq i, j. \quad (1.8)$$

Взаимодействия \hat{V}_{ij} между частицами i и j приобретают особенно простой вид в «своих» переменных $(\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{p}_l)$:

$$\hat{V}_{ij} \Psi[\mathbf{k}, \mathbf{p}] = \int v_{ij}(\mathbf{k}_{ij} - \mathbf{k}'_{ij}) \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{p}'_l) \Psi(\mathbf{k}'_{ij}, \mathbf{p}'_l) d\mathbf{k}'_{ij} d\mathbf{p}'_l. \quad (1.9)$$

Везде ниже, где это не будет оговорено особо, все формулы будут писаться для с.ц.и.

В этой системе у.Ш. — интегральное уравнение в шестимерном пространстве

$$H\Psi[\mathbf{k}, \mathbf{p}] \equiv (H_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}) + \hat{V})\Psi[\mathbf{k}, \mathbf{p}] = E\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{p}); \quad (1.10)$$

где \hat{V} — полное взаимодействие

$$\hat{V} = \hat{V}_{12} + \hat{V}_{23} + \hat{V}_{31}. \quad (1.10')$$

Введем теперь функцию Грина G (ф.Г.) оператора $(\hat{H} - E)$ как симметричное по паре своих векторных аргументов решение уравнения

$$(\hat{H} - E)G(\mathbf{k}, \mathbf{p} | \mathbf{k}', \mathbf{p}'; E) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (1.11)$$

Здесь оператор $(\hat{H} - E)$ действует на первую пару аргументов.

Введем теперь, так же как и в гл. IV, операторы Грина \hat{G} как интегральные операторы, ядром которых является ф.Г. Например:

$$\hat{G}Q[\mathbf{k}, \mathbf{p}] \equiv \int G(\mathbf{k}, \mathbf{p} | \mathbf{k}', \mathbf{p}'; E) Q(\mathbf{k}', \mathbf{p}') d\mathbf{k}' d\mathbf{p}'. \quad (1.12)$$

Умножив уравнение (1.11) справа на произвольную функцию $Q(\mathbf{k}', \mathbf{p}')$, проинтегрировав по \mathbf{k}' , \mathbf{p}' и учтя определение (1.12), получим

$$(\hat{H} - E)(\hat{G}Q[\mathbf{k}, \mathbf{p}]) = Q(\mathbf{k}, \mathbf{p}).$$

Видно, что оператор \hat{G} можно символически записать как

$$\hat{G}(E) = [\hat{H} - (E + i\gamma)]^{-1}. \quad (1.13)$$

К энергии E сделана бесконечно малая мнимая добавка $i\gamma$. Это соответствует «условию излучения» и делает выбор ф.Г. однозначным. Такая запись оператора Грина возможна, ибо все собственные значения гамильтониана действительны, и при $\gamma \neq 0$ оператор $[\hat{H} - (E + i\gamma)]$ всегда отличен от нуля и, следовательно, обратный ему оператор $[\hat{H} - (E + i\gamma)]^{-1}$ конечен при действительном E .

Наиболее простой вид ф.Г. имеет, когда $\hat{V} \equiv 0$. Так как оператор кинетической энергии H_0 в импульсном представлении является оператором умножения на число (см. (1.3), (1.7)), то

$$G_0(\mathbf{k}, \mathbf{p} | \mathbf{k}', \mathbf{p}'; E) = \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{\frac{k^2}{2m} + \frac{p^2}{2n} - (E + i\gamma)}. \quad (1.14)$$

Соответствующий оператор Грина есть

$$\hat{G}_0 \equiv \left[\frac{k^2}{2m} + \frac{p^2}{2n} - (E + i\gamma) \right]^{-1} \equiv G_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}; E),$$

поскольку

$$\hat{G}_0 Q[\mathbf{k}, \mathbf{p}] = \frac{Q(\mathbf{k}, \mathbf{p})}{\frac{k^2}{2m} + \frac{p^2}{2n} - (E + i\gamma)} \equiv G_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}; E) Q(\mathbf{k}, \mathbf{p}). \quad (1.14')$$

Следующим по сложности является случай, когда одна из частиц (l -я) не взаимодействует с двумя остальными (i -й и j -й частицами), и у. Ш. имеет вид

$$(\hat{H}_{ij} - E) \Phi^{(ij)}[\mathbf{k}, \mathbf{p}] \equiv (H_0 + \hat{V}_{ij} - E) \Phi^{(i,j)} = 0. \quad (1.15)$$

Так как оператор \hat{V}_{ij} факторизуется в переменных \mathbf{k}_{ij} , \mathbf{p}_l (см. (1.9)), то уравнение (1.15) в этих переменных имеет особенно простой вид, допускающий разделение переменных. Записав $\Phi^{(ij)}$ в виде

$$\Phi^{(ij)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \varphi^{(ij)}(\mathbf{k}_{ij}) \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{p}_l^{\wedge}) \quad (1.15')$$

и подставляя его в (1.15), найдем с помощью (1.7) — (1.9), что $\Phi^{(ij)}$ является решением уравнения (1.15), если $\varphi^{(ij)}(\mathbf{k}_{ij})$ удовлетворяет уравнению движения для двух частиц:

$$\left(\frac{k_{ij}^2}{2m_{ij}} + \hat{v}_{ij} - \left(E - \frac{p_l^2}{2n_l} \right) \right) \varphi^{(ij)}[\mathbf{k}_{ij}] = 0, \quad (1.16)$$

где оператор \hat{v}_{ij} — взаимодействие между частицами i и j — определен как (ср. с (1.9))

$$\hat{v}_{ij} \varphi[\mathbf{k}_{ij}] = \int v_{ij}(\mathbf{k}_{ij} - \mathbf{k}'_{ij}) \varphi(\mathbf{k}'_{ij}) d\mathbf{k}'_{ij}.$$

При использовании \mathbf{k}_{ij} и \mathbf{p}_l в качестве переменных функцию Грина G_{ij} оператора $(\hat{H}_{ij} - E)$ можно искать в виде произведения

$$G_{ij}(\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{p}_l | \mathbf{k}'_{ij}, \mathbf{p}'_l; E) = g_{ij} \left(\mathbf{k}_{ij} | \mathbf{k}'_{ij}; E - \frac{p_l^2}{2n_l} \right) \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{p}'_l). \quad (1.17)$$

Действительно, подставляя это выражение в уравнение

$$(\hat{H}_{ij} - E) G_{ij} = \delta(\mathbf{k}_{ij} - \mathbf{k}'_{ij}) \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{p}'_l),$$

убеждаемся, что (1.17) является ф. Г. оператора $(\hat{H}_{ij} - E)$, если g_{ij} является двухчастичной функцией Грина, удовлетворяющей уравнению (ср. с (1.16))

$$\left(\frac{k_{ij}^2}{2m_{ij}} + \hat{v}_{ij} - \left(E - \frac{p_l^2}{2n_l} \right) \right) g_{ij} \left(\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{k}'_{ij}; E - \frac{p_l^2}{2n_l} \right) = \delta(\mathbf{k}_{ij} - \mathbf{k}'_{ij}). \quad (1.17)$$

Когда отлично от нуля более чем одно парное взаимодействие \hat{V}_{ij} , переменные в у. Ш., как правило, не разделяются со всеми вытекающими отсюда неприятными последствиями*). Однако и в этом неприятном со многих точек зрения случае могут быть установлены общие соотношения, связывающие ф. Г. \hat{G} общего оператора $(\hat{H} - (E + i\gamma))$ с более простыми ф. Г. G_{ij} операторов $(\hat{H}_{ij} - (E + i\gamma))$.

Наиболее просто эти соотношения можно получить, исходя из определения ф. Г. \hat{G} (1.13) и операторного тождества

$$\frac{1}{\hat{B}} - \frac{1}{\hat{C}} = \frac{1}{\hat{B}} (\hat{C} - \hat{B}) \frac{1}{\hat{C}} = \frac{1}{\hat{C}} (\hat{C} - \hat{B}) \frac{1}{\hat{B}}. \quad (1.18)$$

Положив здесь

$$\hat{B} = (\hat{H} - (E + i\gamma)) \quad \text{и} \quad \hat{C} = (\hat{H}_{ij} - (E + i\gamma)),$$

немедленно получим соотношение, которое можно рассматривать как уравнение для ф. Г.

$$\hat{G} = \hat{G}_{ij} - \hat{G}_{ij} \hat{U}_{ij} \hat{G} = \hat{G}_{ij} - \hat{G} \hat{U}_{ij} \hat{G}_{ij}, \quad (1.19)$$

где $\hat{U}_{ij} = \hat{V} - \hat{V}_{ij}$.

В качестве \hat{V}_{ij} можно выбрать любое из трех парных взаимодействий трехтельной задачи. При этом для одной и той же полной ф. Г. G будут получаться разные уравнения вида (1.19). Таких уравнений три; к ним можно прибавить четвертое, полученное из (1.18) подстановкой вместо \hat{C} оператора $\hat{H}_0 - (E + i\gamma)$:

$$\hat{G} = \hat{G}_0 - \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}. \quad (1.20)$$

Вообще говоря, уравнений для полной функции Грина можно написать бесконечное число, выбирая для \hat{C} выражения $\hat{C} = (\hat{H}_0 + \hat{V} - (E + i\gamma))$, где \hat{V} — произвольное вымышленное взаимодействие между тремя частицами. При этом, однако, теряется генеалогическая перемешанность задачи: задача трех тел выражается не

*) Некоторые частные случаи, когда разделение переменных удается произвести, несмотря на то, что все парные взаимодействия V_{ij} отличны от нуля, будут рассмотрены в конце главы.

только через величины G_{ij} и V_{ij} , характеризующие парные взаимодействия, но и через искусственно вводимое в задачу трех тел фиктивное взаимодействие \hat{V} . По этой причине обычно используются только четыре уравнения (1.19) — (1.20), полученные, так сказать, с помощью натуральных продуктов. Ввиду важности этих уравнений для всего дальнейшего мы выпишем их все вместе в развернутом виде:

$$\hat{G} = \hat{G}_{12} - \hat{G}_{12}(\hat{V}_{31} + \hat{V}_{23})\hat{G}, \quad (1.21a)$$

$$\hat{G} = \hat{G}_{31} - \hat{G}_{31}(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{23})\hat{G}, \quad (1.21б)$$

$$\hat{G} = \hat{G}_{23} - \hat{G}_{23}(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{31})\hat{G}, \quad (1.21в)$$

$$\hat{G} = \hat{G}_0 - \hat{G}_0(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{31} + \hat{V}_{23})\hat{G}. \quad (1.21г)$$

Все входящие сюда операторы Грина, конечно, соответствуют одному и тому же значению полной энергии трех частиц E .

§ 2. Переход к уравнениям Липпмана — Швингера

Всякое соударение можно условно разделить на три основных этапа:

1. Начальное состояние — сталкивающиеся частицы движутся навстречу друг другу. При этом часть парных взаимодействий как бы оказывается выключенной: если сталкиваются, например, связанное состояние частиц 1 и 2 (частица $\{1\ 2\}$) с третьей частицей, то взаимодействия V_{31} и V_{23} на этой стадии можно положить равными нулю, если величина этих потенциалов достаточно быстро падает с увеличением расстояния между частицами;

2. Этап самого соударения — сталкивающиеся частицы подходят достаточно близко друг к другу и вступают в игру все взаимодействия;

3. Конечное состояние — продукты соударения разлетаются в разные стороны. На этой конечной стадии процесса, часть взаимодействий опять выключается: если разлетаются частица $\{1\ 2\}$ и частица 3 (произошло упругое рассеяние $\{1\ 2\} + 3 \rightarrow \{1\ 2\} + 3$), то выключены,

очевидно, взаимодействия V_{31} и V_{23} . Если произошел полный развал системы ($\{1\ 2\} + 3 \rightarrow 1 + 2 + 3$), то в конечном состоянии все три частицы находятся далеко друг от друга, и поэтому выключены все три взаимодействия V_{12} , V_{31} и V_{23} . Если произошла какая-либо реакция, например $\{1\ 2\} + 3 \rightarrow 1 + \{2\ 3\}$, то в конечном состоянии выключены только V_{12} и V_{13} и т. д.

В задаче трех тел может существовать несколько типов начальных (конечных) состояний, принадлежащих непрерывному спектру.

А. Все три частицы свободны. Волновая функция такого движения есть

$$\Phi_{K P}^{(0)}(k, p) = \delta(k - K) \delta(p - P), \quad (2.1)$$

где заглавной буквой (K или P) обозначено численное значение соответствующего импульса, а строчной буквой — переменная импульсного представления. Здесь K — импульс относительного движения каких-либо двух частиц, а P — импульс оставшейся частицы относительно этой пары. Энергия состояния (2.1), очевидно, есть

$$E = \frac{K^2}{2m} + \frac{P^2}{2n},$$

а сама волновая функция $\Phi_{K P}^{(0)}$ удовлетворяет свободному уравнению Шредингера

$$(H_0 - E) \Phi_{K P}^{(0)}[k, p] = 0. \quad (2.2)$$

Б. Две частицы (i -я и j -я) образуют связанное состояние $\{i\ j\}$ с энергией $\varepsilon_{ij} < 0$, а оставшаяся (l -я) частица свободна. Импульс относительного движения l -й частицы и частицы $\{i\ j\}$ есть P_l . Волновая функция такого состояния равна

$$\Phi_{\varepsilon_{ij} P_l}^{(ij)}(k_{ij}, p_l) = \varphi_{\varepsilon_{ij}}(k_{ij}) \delta(p_l - P_l), \quad (2.3)$$

где $\varphi_{\varepsilon_{ij}}$ — волновая функция связанного состояния i -й и j -й частиц (частица $\{i\ j\}$). Функция (2.3) отвечает состоянию с полной энергией

$$E = \varepsilon_{ij} + \frac{P_l^2}{2n_l},$$

а сама функция (2.3) является решением уравнения Шредингера

$$(\hat{H}_{ij} - E) \Phi_{\varepsilon_{ij} p_l}^{(i)}[\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{p}_l] = 0, \quad (2.4)$$

где

$$\hat{H}_{ij} = H_0 + \hat{V}_{ij}.$$

Теперь, после того как введены все обозначения, перейдем к выводу уравнений движения в нужном нам виде. Пусть нас теперь интересует какой-то конкретный процесс соударения, когда начальное состояние задано и записывается волновой функцией $\Phi_\alpha^{(0)}$. Здесь δ может принимать значения 0, 12, 13, 23 в соответствии с четырьмя возможностями (см. (2.1) и (2.3)). Индекс α означает совокупность квантовых чисел начального состояния: $\alpha \equiv [K, P]$ или $\alpha = [\varepsilon_{ij}, P]$. Полную волновую функцию естественно представлять в виде

$$\Psi_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \Phi_\alpha^{(0)} + X(\mathbf{k}, \mathbf{p}), \quad (2.5)$$

где $\Phi_\alpha^{(0)}$ описывает начальное состояние, а X учитывает все искажения начального состояния в результате соударения.

Подставляя (2.5) в уравнение Шредингера задачи, получим

$$(\hat{H} - E) \Psi_\alpha \equiv \{\hat{H} - E\} X + \hat{U}_\delta \Phi_\alpha^{(0)} = 0, \quad (2.6)$$

где

$$\hat{U}_\delta = \begin{cases} \hat{V} - \hat{V}_\delta & \text{при } \delta = 12, 13, 23, \\ \hat{V} & \text{при } \delta = 0. \end{cases} \quad (2.7)$$

При переходе от левой части к правой в (2.6) учтено, что волновая функция начального состояния удовлетворяет одному из уравнений (2.2) или (2.4). Из (2.6) следует далее, что

$$X(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = -\hat{G}(E) \hat{U}_\delta \Phi_\alpha^{(0)}[\mathbf{k}, \mathbf{p}], \quad (2.8)$$

где \hat{G} — оператор Грина

$$\hat{G} = [\hat{H} - (E + i\gamma)]^{-1},$$

Подставляя (2.8) в (2.5), получаем после несложных манипуляций с операторами

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha &= \Phi_\alpha^{(0)} - [\hat{H} - (E + i\gamma)]^{-1} \hat{U}_\delta \Phi_\alpha^{(0)} = \\ &= \{1 - [\hat{H} - (E + i\gamma)]^{-1} \hat{U}_\delta\} \Phi_\alpha^{(0)} = \\ &= \frac{[\hat{H} - (E + i\gamma) - \hat{U}_\delta]}{[\hat{H} - (E + i\gamma)]} \Phi_\alpha^{(0)} = -i\gamma \hat{G}(E + i\gamma) \Phi_\alpha^{(0)}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

где мы опять воспользовались тем, что волновая функция начального состояния удовлетворяет уравнению

$$(\hat{H}_0 + (\hat{V} - \hat{U}_\delta) - E) \Phi_\alpha^{(0)} = 0.$$

Уравнение (2.9) в форме

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{p}) &= -i\gamma \hat{G}(E + i\gamma) \Phi_\alpha^{(0)}[\mathbf{k}, \mathbf{p}] \equiv \\ &\equiv -i\gamma \int G(\mathbf{k}, \mathbf{p} | \mathbf{k}', \mathbf{p}'; E) \Phi_\alpha^{(0)}(\mathbf{k}', \mathbf{p}') d\mathbf{k}' d\mathbf{p}' \end{aligned} \quad (2.9')$$

обычно называют уравнением Липпмана — Швингера для задачи трех тел. Наиболее важным свойством этого уравнения, как и вообще всех уравнений такого типа, введенных впервые Липпманом и Швингером, является то, что в уравнение явно введено граничное условие в виде волновой функции $\Phi_\alpha^{(0)}$ начального состояния.

Теперь несколько слов по поводу немного необычного вида уравнения (2.9'). В § 1 этой главы отмечалось, что оператор Грина (1.13) всегда существует при отличной от нуля постоянной γ . Смысл этого замечания сводится к тому, что при действии оператора Грина на любую собственную функцию Ψ_{E_0} оператора \hat{H} ($\hat{H}\Psi_{E_0} = E_0\Psi_{E_0}$) получается вполне определенный конечный результат (см. § 7 гл. IV)

$$\hat{G}(E) \Psi_{E_0} = \frac{1}{\hat{H} - (E + i\gamma)} \Psi_{E_0} = \frac{1}{E_0 - (E + i\gamma)} \Psi_{E_0}. \quad (2.10)$$

Конечность результата гарантируется мнимой добавкой $i\gamma$ к энергии, которая мешает коэффициенту в правой части (2.10) обратиться в бесконечность даже при

$E = E_0$. Умножив теперь обе стороны (2.10) на $-i\gamma$ и устремив затем γ к нулю, получим справа нуль во всех случаях, кроме одного: когда оператор $-i\gamma\hat{G}(E)$ действует на собственную функцию Ψ_E , отвечающую тому значению энергии, которое стоит в аргументе оператора Грина. В этом последнем случае будем иметь

$$-i\gamma\hat{G}(E)\Psi_E = \frac{-i\gamma}{E - (E + i\gamma)}\Psi_E = \Psi_E. \quad (2.10')$$

Такая процедура с введением мнимой добавки $i\gamma$ к энергии во всех промежуточных формулах обеспечивает сходимость всех интегралов и делает однозначным результат расчета.

Равенства (2.10), (2.10') относятся к собственным функциям гамильтониана \hat{H} , для которого построен оператор Грина. Но их легко обобщить на случай более широкого класса функций — функций, разлагаемых по системе функций Ψ_E . Предоставляем читателю это сделать. Отметим здесь только одну формулу, получающуюся при этом и нужную нам в дальнейшем:

$$-i\gamma\hat{G}_\beta(E)\Phi_\alpha^{(0)}[\mathbf{k}, \mathbf{p}] = \delta_{\beta\delta}\Phi_\alpha^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}). \quad (2.11)$$

Здесь $\delta_{\beta\delta}$ — символ Кронекера, $\Phi_\alpha^{(0)}$ — волновая функция типа (2.3) (индекс δ может принимать значения $\delta = 1\ 2, 1\ 3, 2\ 3$), описывающая движение связанного состояния пары частиц относительно оставшейся частицы, а \hat{G}_β может быть любым из трех операторов Грина $\hat{G}_{12}, \hat{G}_{23}, \hat{G}_{31}$ (см. (1.17)).

§ 3. Уравнения Фаддеева

Уравнения Липпмана — Швингера не очень удобны для исследования и для получения конкретных результатов. Поэтому, хотя они были написаны довольно давно, реальный прогресс в решении задачи трех тел наступил только в последние годы после работ Л. Д. Фаддеева (1960, 1963). Ниже в этом параграфе мы выведем уравнения Фаддеева ((3.1), (3.2), (3.3), (3.11)),

а в следующих параграфах будет показано, как они используются при решении различных задач.

В уравнение (2.9') для волновой функции Ψ_α входит полная функция Грина взаимодействующих частиц G , которая может быть написана в явном виде, только когда известен полный набор волновых функций задачи трех тел. Поэтому в виде (2.9) это уравнение нельзя использовать для вычисления Ψ_α ; можно, однако, его привести к более удобному виду, используя уравнения (1.21) для G .

Пусть для определенности рассматривается соудание связанного состояния $\{1\ 2\}$ частиц 1 и 2 с третьей частицей. Волновая функция начального состояния есть $\Phi_{\mathbf{e}_{12}, \mathbf{p}_3}^{(12)}$. Подставив по очереди в правую часть (2.9) равенства (1.21a) — (1.21в) и используя (2.9) и (2.11), получим три уравнения:

$$\Psi = \Phi_{\mathbf{e}_{12}, \mathbf{p}_3}^{(12)} - \hat{G}_{12}(\hat{V}_{23} + \hat{V}_{31})\Psi, \quad (3.1a)$$

$$\Psi = -G_{23}(V_{12} + V_{31})\Psi, \quad (3.1б)$$

$$\Psi = -G_{31}(V_{12} + V_{23})\Psi. \quad (3.1в)$$

Здесь мы подошли к существенному моменту, когда проявляется принципиальное отличие задачи трех тел от задачи двух тел. В задаче двух тел все граничные условия содержатся в функции Грина. В принципе дело обстоит точно так же и в задаче трех тел, если используется полный оператор Грина \hat{G} . Однако реально построить его пока не представляется возможным, и приходится пользоваться его выражением через более простые операторы \hat{G}_{ij} . В последних, однако, учтены не все граничные условия задачи. Из способа их определения (1.17) следует, что $\hat{G}_{ij}Q$ (Q — функция, на которую действует \hat{G}_{ij} в правых частях уравнений (3.1)) в координатном представлении содержит только расходящиеся волны ($\gamma > 0!$) по координате \mathbf{r}_{ij} относительных движений i -й и j -й частиц. Сходящихся волн по этой координате нет. Что же касается относительного движения оставшейся l -й частицы и частиц i и j , то здесь положение

ние совсем иное. Функция $\hat{G}_{ij}Q$ содержит и расходящиеся и сходящиеся волны по координатам r_{il} и r_{jl} , что видно из (1.17). В результате получается, что в каждом из операторов \hat{G}_{ij} «условие излучения» наложено только на одну пару частиц ij , и, таким образом, в операторе \hat{G}_{ij} содержатся не все граничные условия задачи трех тел. В частности, функция $\hat{G}_{12}(\hat{V}_{23} + \hat{V}_{31})\Psi$ в (3.1a) может содержать члены, описывающие сходящиеся волны частиц {1 3} и 2 и (или) частиц {2 3} и 1. Между тем по условию задачи таких членов в волновой функции Ψ быть не должно.

Таким образом, взятое само по себе уравнение (3.1a) не обеспечивает однозначности решения. Чтобы сделать решение однозначным, необходимо использовать все три уравнения (3.1a), (3.1б) и (3.1в) и искать совместное их решение. Первое из этих уравнений гарантирует самим своим видом выполнение «условия излучения» по координате r_{12} , второе — по координате r_{31} , а третье — по координате r_{23} .

Совершенно аналогичные рассуждения показывают, что если начальное состояние рассматриваемого процесса есть

$$\alpha_{12}\Phi^{(12)} + \alpha_{23}\Phi^{(23)} + \alpha_{31}\Phi^{(31)},$$

где α_{ij} — произвольные числа, то волновая функция задачи должна находиться из решения системы трех уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \Psi &= \alpha_{12}\Phi^{(12)} - \hat{G}_{12}(\hat{V}_{23} + \hat{V}_{31})\Psi, \\ \Psi &= \alpha_{23}\Phi^{(23)} - \hat{G}_{23}(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{31})\Psi, \\ \Psi &= \alpha_{31}\Phi^{(31)} - \hat{G}_{31}(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{23})\Psi. \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

Уравнение (1.21г) нами не использовалось. Его учет не прибавляет ничего нового, так как все граничные условия задачи уже учтены в трех уравнениях системы (3.2). Совершенно аналогичная ситуация возникает и при решении задач об одновременном соударении всех трех сначала свободных частиц (начальное состояние $\Phi^{(0)}$ (см. (2.1)). Система уравнений, которую надо ре-

шать в этом случае, есть:

$$\left. \begin{aligned} \Psi &= \Phi^{(0)} - \hat{G}_0(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{23} + \hat{V}_{31})\Psi, \\ \Psi &= \Psi^{(12)} - \hat{G}_{12}(\hat{V}_{23} + \hat{V}_{31})\Psi, \\ \Psi &= \Psi^{(23)} - \hat{G}_{23}(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{31})\Psi, \\ \Psi &= \Psi^{(31)} - \hat{G}_{31}(\hat{V}_{12} + \hat{V}_{23})\Psi. \end{aligned} \right\} \quad (3.3)$$

Входящие в три нижние уравнения функции $\Psi^{(ij)}$ — это собственные функции гамильтонианов \hat{H}_{ij}

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}_{ij} - E)\Psi^{(ij)} = 0, \quad (3.4)$$

отвечающие общему для всех начальному состоянию $\Phi_{Kl}^{(0)} \equiv \Phi_{K_{ij}p_l}^{(0)}$ ($l = 1, 2, 3$). Функции Ψ^{ij} имеет вид

$$\Psi_{K_{ij}p_l}^{(ij)}(\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{p}_l) = \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{P}_l) \Phi_{K_{ij}}(\mathbf{k}_{ij}), \quad (3.5)$$

а $\Phi_{K_{ij}}$ — волновая функция относительного движения i -й и j -й частиц, отвечающая задаче рассеяния этих частиц друг на друге с начальным импульсом K_{ij} :

$$\Phi_{K_{ij}}(\mathbf{k}_{ij}) = \delta(\mathbf{k}_{ij} - \mathbf{K}_{ij}) - \frac{t(\mathbf{k}_{ij})}{\frac{k_{ij}^2 - K_{ij}^2}{2m_{ij}} - i\gamma}. \quad (3.6)$$

Так же как и в предыдущем случае, для однозначного решения задачи о тройном рассеянии достаточно решить систему из 2-го, 3-го и 4-го уравнений (3.3). Первое из уравнений (3.3) может быть отброшено, так как оно не несет никакой дополнительной информации.

Вопрос о неоднозначностях автоматически снимается в задачах о связанном состоянии всех трех частиц, так как наличие в волновой функции членов типа $\Phi^{(ij)}$ запрещено по энергетическим соображениям (энергия $E_{св}$ связанного состояния трех частиц, очевидно, меньше, чем энергия ϵ_{ij} любого связанного состояния пары частиц). Поэтому в задачах на связанные состояния системы частиц можно ограничиться решением лишь одного какого-либо из однородных уравнений, входящих в (3.3), а не всей системы.

Ниже мы ограничимся рассмотрением задачи о столкновении частицы l с составной частицей $\{ij\}$. Начальное состояние в этом случае описывается функцией

$$\Phi_{e_{ij}, P_l}^{(il)}(\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{p}_l) = \varphi_{e_{ij}}(\mathbf{k}_{ij}) \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{P}_l), \quad (3.7)$$

где $\varphi_{e_{ij}}(\mathbf{k}_{ij})$ — внутренняя волновая функция составной частицы $\{ij\}$.

Как будет показано в § 4, для вычисления сечений всех процессов, происходящих в результате столкновения:

$$\left. \begin{array}{l} \{ij\} + l \rightarrow \{ij\} + l, \\ \rightarrow \{il\} + j, \\ \rightarrow \{jl\} + i, \\ \rightarrow i + j + l, \end{array} \right\} \quad (3.8)$$

нужна не сама волновая функция Ψ , а величины

$$T^{(12)} = \hat{V}_{12} \Psi, \quad T^{(23)} = V_{23} \Psi, \quad T^{(31)} = V_{31} \Psi. \quad (3.9)$$

В ряде случаев найти эти величины проще, чем саму волновую функцию (см. об этом ниже). Поэтому удобно написать уравнение непосредственно для них. Перепишем сначала систему уравнений для Ψ в следующем виде:

$$\left. \begin{array}{l} \Psi = \Phi^{(il)} - \hat{G}_{ij}(\hat{V}_{ii} + \hat{V}_{jl}) \Psi, \\ \Psi = -\hat{G}_{ii}(\hat{V}_{ij} + \hat{V}_{il}) \Psi, \\ \Psi = -\hat{G}_{jl}(\hat{V}_{jj} + \hat{V}_{il}) \Psi. \end{array} \right\} \quad (3.10)$$

Умножим в операторном смысле первое уравнение слева на \hat{V}_{ij} , второе — слева на \hat{V}_{ii} и третье — слева на \hat{V}_{jl} . При этом получаем следующую систему уравнений для $T^{(il)}$, определенных формулами (3.9):

$$\left. \begin{array}{l} T^{(il)} = \tilde{T}_{ij} - T_{ij} G_0 (T^{(il)} + T^{(il)}), \\ T^{(il)} = -T_{ii} G_0 (T^{(il)} + T^{(il)}), \\ T^{(il)} = -T_{jl} G_0 (T^{(il)} + T^{(il)}), \end{array} \right\} \quad (3.11)$$

где мы ввели обозначения

$$\tilde{T}_{ij} \equiv \hat{V}_{ij} \Phi^{(il)}, \quad \hat{T}_{mn} \hat{G}_0 \equiv \hat{V}_{mn} \hat{G}_{mn}. \quad (3.12)$$

Определяемые этими соотношениями функция \tilde{T}_{ij} и операторы \hat{T}_{mn} имеют, как мы сейчас увидим, простой физический смысл и целиком выражаются через параметры парных взаимодействий между частицами.

Прежде всего упростим выражение для \tilde{T}_{ij} . Используя определение (3.7), находим

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{ij}(\mathbf{k}_{ij}, \mathbf{p}_l) &= \\ &= \int v_{ij}(\mathbf{k}_{ij} - \mathbf{k}'_{ij}) \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{p}'_l) \varphi_{e_{ij}}(\mathbf{k}'_{ij}) \delta(\mathbf{p}'_l - \mathbf{P}_l) d\mathbf{p}'_l d\mathbf{k}'_{ij} = \\ &= \delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{P}_l) \hat{v}_{ij} \varphi_{e_{ij}}[\mathbf{k}_{ij}] = \\ &= -\delta(\mathbf{p}_l - \mathbf{P}_l) \left(|\varepsilon_{ij}| + \frac{k_{ij}^2}{2m_{ij}} \right) \varphi_{e_{ij}}(\mathbf{k}_{ij}). \end{aligned} \quad (3.13)$$

В последнем из этой цепочки равенств использовано то, что функция $\varphi_{e_{ij}}$ является решением у. Ш. для двух частиц, описывающих связанное состояние с энергией ε_{ij} :

$$\begin{aligned} \left(\frac{k_{ij}^2}{2m_{ij}} + \hat{v}_{ij} - \varepsilon_{ij} \right) \varphi_{e_{ij}}(\mathbf{k}_{ij}) &= 0, \quad \text{т. е.} \quad \hat{v}_{ij} \varphi_{e_{ij}}[\mathbf{k}_{ij}] = \\ &= -\left(\frac{k_{ij}^2}{2m_{ij}} + |\varepsilon_{ij}| \right) \varphi_{e_{ij}}(\mathbf{k}_{ij}). \end{aligned}$$

Таким образом, с функцией \tilde{T}_{ij} все ясно; в ее выражение (3.13), помимо волновой функции $\varphi_{e_{ij}}$ составной частицы $\{ij\}$, входят энергия связи этой частицы $-\varepsilon_{ij} = |\varepsilon_{ij}|$ и начальный импульс \mathbf{P}_l соударяющихся частиц $\{ij\}$ и l .

Обратимся теперь к выяснению смысла операторов \hat{T}_{mn} . Заметим прежде всего, что ф. Г. \hat{G}_{ij} удовлетворяет уравнению

$$\hat{G}_{ij} = \hat{G}_0 - \hat{G}_0 \hat{V}_{ij} \hat{G}_{ij} = \hat{G}_0 - \hat{G}_{ij} \hat{V}_{ij} \hat{G}_0, \quad (3.14)$$

в которую переходит система (1.21) в случае, когда все парные взаимодействия, кроме \hat{V}_{ij} , тождественно равны

нулю. Подставляя в определение (3.12) амплитуд \hat{T}_{mn} вместо \hat{G}_{mn} выражения, стоящие в правой части (3.14), и сокращая затем на \hat{G}_0 , получим тождества

$$\hat{T}_{mn} = \hat{V}_{mn} - \hat{V}_{mn} \hat{G}_0 \hat{T}_{mn}, \quad (3.15)$$

$$\hat{T}_{mn} = \hat{V}_{mn} - \hat{V}_{mn} \hat{G}_{mn} \hat{V}_{mn}. \quad (3.16)$$

Первое из этих тождеств можно рассматривать как уравнение для операторов \hat{T}_{mn} . Второе из тождеств выражает \hat{T}_{mn} через \hat{V}_{mn} и \hat{G}_{mn} . С помощью (3.15) и (3.16) легко получить и формулу, выражающую \hat{G}_{mn} через \hat{T}_{mn} :

$$\hat{G}_{mn} = \hat{G}_0 - \hat{G}_0 \hat{T}_{mn} \hat{G}_0. \quad (3.17)$$

Все эти формулы по своей структуре совпадают с формулами (8.8), (8.9), (8.11), (8.12) гл. IV, связывающими потенциал \hat{v} , функцию Грина \hat{g}_E и оператор рассеяния \hat{t}_E . Фактически соотношения (3.15)–(3.17) являются тривиальным обобщением этих формул гл. IV. Чтобы убедиться в этом, заметим, что операторы \hat{V}_{mn} и \hat{G}_{mn} в «своих» переменных \mathbf{k}_{mn} и \mathbf{p}_t ($t \neq m, n$) факторизуются (см. (1.9) и (1.17)). Из выписанных выше уравнений тогда следует, что операторы \hat{T}_{mn} также обладают этим свойством; из (3.16), например, видно, что ядро оператора \hat{T}_{mn} можно представить в виде

$$T_{mn}(\mathbf{k}_{mn}, \mathbf{p}_t; \mathbf{k}'_{mn}, \mathbf{p}'_t; E) \equiv t_{mn}(\mathbf{k}_{mn}, \mathbf{k}'_{mn}; \varepsilon_t) \delta(\mathbf{p}_t - \mathbf{p}'_t), \quad (3.18)$$

$$\varepsilon_t \equiv E - \frac{p_t^2}{2n_t},$$

где $t_{mn}(\mathbf{k}_{mn}, \mathbf{k}'_{mn}; \varepsilon_t)$ ядро оператора $\hat{t}_{mn, \varepsilon_t}$, действующего только на функции относительного импульса \mathbf{k}_{mn} и удовлетворяющего уравнению

$$\hat{t}_{mn, \varepsilon_t} = \hat{v}_{mn} - \hat{v}_{mn} \hat{g}_{\varepsilon_t}^{(0)} \hat{t}_{mn, \varepsilon_t}$$

из которого полностью исключены координаты третьей (t -й) частицы. Входящие сюда операторы \hat{v}_{mn} и $\hat{g}_{\varepsilon_t}^{(0)}$ — это соответственно взаимодействие и ф. Г. свободного движения m -й и n -й частиц. Это уравнение уже не только

по структуре, но и буквально совпадает с уравнением (8.8) гл. IV, определяющим оператор рассеяния двух частиц.

Таким образом, действительно, операторы \hat{T}_{mn} , входящие в систему уравнений (3.11), являются обобщением парного оператора рассеяния m -й и n -й частиц \hat{t}_{mn} на случай присутствия третьей, t -й частицы. Ее присутствие проявляется в появлении δ -функции в (3.18) и в том, что в парный оператор рассеяния входит не полная энергия E , а лишь та ее часть $\varepsilon_t = E - \frac{p_t^2}{2n_t}$, которая остается после отделения от E кинетической энергии движения t -й частицы относительно центра тяжести частиц m и n .

Во избежание недоразумений следует помнить только, что везде в этой главе мы пользуемся именно импульсным представлением, а не представлением волновых векторов, как в гл. VI. Отличие заключается в различной нормировке волновых функций:

$$\text{в импульсном представлении } \psi_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}},$$

$$\text{в представлении волновых векторов } \psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.$$

Результатом является отличие в нормировках двухчастичных операторов \hat{v}_{ij} , \hat{g}_{ij} , \hat{t}_{ij} , используемых в настоящей главе, по сравнению с соответствующими операторами гл. IV. Например, из сравнения формул (1.4), (1.5) и (6.3) гл. IV немедленно получаем для ядра оператора взаимодействия первой и второй частиц (их массы считаем одинаковыми)

$$V_{k\text{-предст}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^6} \int e^{i(\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2\mathbf{r}_2)} V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{-i(\mathbf{k}'_1\mathbf{r}_1 + \mathbf{k}'_2\mathbf{r}_2)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 =$$

$$= \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \frac{1}{(2\pi)^3} \int V(t) e^{i \frac{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - (\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2)}{2} \cdot \mathbf{t}} dt \equiv$$

$$\equiv \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) v_{k\text{-предст}} \left(\frac{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - (\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2)}{2} \right),$$

$$\begin{aligned}
V_{p\text{-предст}}(p_1, p_2; p'_1, p'_2) &= \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int e^{i \frac{p_1 r_1 + p_2 r_2}{\hbar}} V(r_1 - r_2) e^{-i \frac{p'_1 r_1 + p'_2 r_2}{\hbar}} dr_1 dr_2 = \\
&= \frac{1}{\hbar^6} V_{k\text{-предст}}\left(\frac{p_1}{\hbar}, \frac{p_2}{\hbar}; \frac{p'_1}{\hbar}, \frac{p'_2}{\hbar}\right) = \\
&= \delta(p_1 + p_2 - p'_1 - p'_2) v_{p\text{-предст}}\left(\frac{(p_1 - p_2) + (p'_1 - p'_2)}{2}\right) = \\
&= \delta(p_1 + p_2 - p'_1 - p'_2) \frac{1}{\hbar^3} v_{k\text{-предст}}\left(\frac{(p_1 - p_2) - (p'_1 - p'_2)}{2\hbar}\right).
\end{aligned}$$

§ 4. Общие формулы для сечений

Приведенные в предыдущем параграфе формулы (3.13) и (3.18) для величин T_{ij} и \hat{T}_{ij} , \hat{T}_{il} и \hat{T}_{jl} делают полностью определенной систему уравнений (3.11) для функций $\hat{V}_{ij}\Psi \equiv T^{(ij)}$. Эта система, как было доказано Л. Д. Фаддеевым, имеет единственное решение. Не останавливаясь пока на способах конкретного отыскания решений (об этом будет говориться в §§ 5—9), покажем, как, исходя из известной системы решений $T^{(ij)}$ ($i \neq j = 1, 2, 3$), вычислять сечения различных физических процессов.

Пусть происходит столкновение частиц $\{ij\} + l$, так что волновая функция начального состояния есть $\Phi_{e_{ij}, p_l}^{(ij)}$, а точная волновая функция, являющаяся решением системы (3.10), есть Ψ_{e_{ij}, p_l} ; ниже в этом параграфе квантовые числа начального состояния будем обозначать символом $i \equiv (e_{ij}, p_l)$: Φ_i , Ψ_i и т. д.

Рассмотрим переход $\{ij\} + l \rightarrow \{i_1 j_1\} + l_1$ в состояние с волновой функцией $\Phi_{e_{i_1 j_1}, p_{l_1}}^{(i_1 j_1)}$; квантовые числа этого конечного состояния обозначим через $f \equiv (e_{i_1 j_1}, p_{l_1})$. Вероятность $d\omega_{i \rightarrow f}$ перехода $i \rightarrow f$, согласно общим правилам квантовой механики, записывается как

$$d\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{T}_{i \rightarrow f}|^2 \delta(E_i - E_f) df, \quad (4.1)$$

где df — бесконечно малый интервал квантовых чисел конечного состояния:

$$df = dP_{l_1}, \quad (4.2)$$

а $\mathcal{T}_{i \rightarrow f}$ — амплитуда перехода, равная матричному элементу

$$\mathcal{T}_{i \rightarrow f} = -(\Phi_f, U_f \Psi_i). \quad (4.3)$$

Здесь U_f — часть взаимодействия, не включенная в Φ_f . В рассматриваемом случае

$$\hat{U}_f = \hat{V} - \hat{V}_{i, l_1} = \hat{V}_{i, l_1} + \hat{V}_{j, l_1}. \quad (4.4)$$

Чтобы получить сечение процесса $i \rightarrow f$, надо разделить вероятность (4.1) на поток сталкивающихся частиц; при принятой нами нормировке волновых функций, поток сталкивающихся частиц есть

$$\mathcal{J}_i = \frac{v_l}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (4.5)$$

где v_l — относительная скорость сталкивающихся частиц $\{ij\}$ и l . В результате для сечения $i \rightarrow f$ получаем

$$\begin{aligned}
d\sigma_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{T}_{i \rightarrow f}|^2 \delta\left(E_i - \frac{P_{l_1}^2}{2n_{l_1}} - \varepsilon_{i, l_1}\right) \frac{(2\pi\hbar)^3}{v_l} dP_{l_1} = \\
&= (2\pi)^4 \hbar^2 |\mathcal{T}_{i \rightarrow f}|^2 \frac{P_{l_1}}{P_i} n_l n_{l_1} d\Omega_{P_{l_1}}. \quad (4.6)
\end{aligned}$$

Здесь P_i и P_{l_1} — относительные импульсы частиц l и $\{ij\}$ в начальном и частиц l_1 и $\{i_1 j_1\}$ в конечном состояниях; n_l и n_{l_1} — соответствующие приведенные массы, а $d\Omega_{P_{l_1}}$ — элемент телесного угла вокруг направления разлета конечных частиц.

Переходя к введенным в (3.9) величинам $T^{(ij)}$, перепишем матричный элемент перехода (4.3) как

$$\mathcal{T}_{i \rightarrow f} = - \int \Phi_f^*(k, p) [T^{(i, l_1)}(k, p) + T^{(j, l_1)}(k, p)] dk dp. \quad (4.7)$$

Совокупность формул (4.6), (4.7) решает задачу о вычислении сечений всех реакций с двумя свободными частицами в начальном и конечном состояниях.

Кроме реакций такого типа, может происходить реакция развала

$$\{ij\} + l \rightarrow i + j + l,$$

в которой все три конечные частицы свободные. Матричный элемент такого развала есть

$$\mathcal{F}_{\text{разв}} = -(\Phi_i^{(0)}, \hat{V}\Psi_l) = T^{(12)} + T^{(13)} + T^{(23)} \equiv T(\mathbf{k}, \mathbf{p}). \quad (4.8)$$

Конечное состояние при этом характеризуется двумя импульсами \mathbf{k} и \mathbf{p} и сечение развала записывается как

$$d\sigma_{\text{разв}} = \frac{(2\pi\hbar)^4 h^2}{v_l} |T|^2 \delta\left[E_l - \left(\frac{p^2}{2n} + \frac{k^2}{2m}\right)\right] d\mathbf{k} d\mathbf{p}. \quad (4.9)$$

На этом мы окончим изложение общего формализма квантовой механики в применении к проблеме трех тел. В следующих параграфах этой главы будут рассмотрены некоторые частные задачи трех тел, в которых благодаря упрощениям различного рода можно продвинуться значительно дальше общей системы уравнений (3.11).

§ 5. Уравнение Скорнякова — Тер-Мартirosяна

Мы уже отмечали, что работой, положившей начало строгим расчетам в квантовомеханической задаче трех тел, была работа Г. В. Скорнякова и К. А. Тер-Мартirosяна, выполненная в 1956 г. Ими были получены одномерные интегральные уравнения для решения задачи о рассеянии в системе трех нуклонов, взаимодействующих силами бесконечно малого радиуса действия. Ниже мы будем называть уравнениями типа Скорнякова — Тер-Мартirosяна любое такое уравнение для трех частиц с $m_1 = m_2 = m_3$ вне зависимости от спинов частиц. Отметим, что уравнения такого типа не пригодны для описания связанных состояний трех частиц. Из-за наложения сингулярных потенциалов v_{13} , v_{12} , v_{23} друг на друга при $r_1 = r_2 = r_3$ возникает явление, которое обычно называют падением на центр. Именно, наличие сильной сингулярности в гамильтониане приводит к тому, что квадратично интегрируемое решение уравнения Шредингера существует при любом отрицательном значении

полной энергии системы E . Другими словами, спектр уравнения оказывается непрерывным при всех E : $-\infty < E < \infty$. Впервые этот факт был замечен более чем 30 лет назад, когда было доказано (Л. Томас, 1935), что у трех частиц с точечным взаимодействием, которым принцип Паули позволяет всем находиться в одной точке, энергия основного состояния $E_0 \rightarrow -\infty$. Впоследствии, правда, был предложен способ частично обходить эту трудность (Г. С. Данилов, 1961; Р. А. Минлос, Л. Д. Фаддеев, 1961).

После 1956 г. был выполнен еще ряд работ, посвященных этим уравнениям, в которых проводилось либо их исследование и решение, либо предлагались новые способы их вывода. Ниже мы выведем уравнение типа уравнения Скорнякова — Тер-Мартirosяна для простейшего случая — для трех одинаковых бесспиновых частиц. Учет спинов и изоспинов ввел бы ненужную здесь громоздкость.

Будем рассматривать рассеяние одной из частиц на дейтроне, сделанном из двух других частиц и будем считать волновую функцию симметричной относительно перестановки любой пары частиц. В этом случае все три функции $T^{(ij)}$ в уравнении Фаддеева типа (3.11) одинаковы. Здесь следует иметь в виду, что симметрия волновой функции относительно перестановок частиц требует и симметрии «начальных условий»; это означает, что при выводе уравнений Фаддеева надо исходить из системы уравнений (3.2) с $1 = \alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{13}$. В результате, вместо (3.11) получится система трех одинаковых уравнений

$$T^{(ij)} = \tilde{T}_{ij} - \hat{T}_{ij} \hat{G}_0 (T^{(il)} + T^{(jl)}) \text{ с } i \neq j \neq l,$$

и достаточно рассмотреть только одно из этих трех уравнений, например

$$T^{(12)} = \tilde{T}_{12} - T_{12} G_0 (T^{(23)} + T^{(31)}). \quad (5.1)$$

Вводим обозначения

$$T^{(12)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = T^{(23)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = T^{(31)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \mathcal{F}(\mathbf{k}, \mathbf{p}); \quad (5.2)$$

$$T_{12} = T_{23} = T_{31} = T_0(\mathbf{k}, \mathbf{p}; \mathbf{k}', \mathbf{p}'; E).$$

Эти равенства следует понимать только как одинаковость функций, но при этом нужно помнить, что в уравнении (5.1) каждая из них входит зависящей от «своей» пары переменных: $T^{(12)}$ — функция переменных k_{12} , p_3 , $T^{(23)}$ — переменных k_{23} , p_1 и т. д.

Поэтому следует одну пару переменных, например, $k_{12} \equiv k$ и $p_3 \equiv p$, выбрать за независимые, остальные переменные k_{13} , k_{23} , p_2 , p_1 следует выразить через k и p с помощью формул (1.6). Сделав это, перепишем уравнение (5.1), выписав в нем переменные в явном виде и воспользовавшись введенными в (5.2) обозначениями

$$\mathcal{F}(k, p) = \tilde{T}_0(k, p) - \int \left[T_0\left(k, p; -\frac{k'}{2} + \frac{3}{4}p', -k' - \frac{p'}{2}; E\right) + T_0\left(k, p; -\frac{k'}{2} + \frac{3}{4}p', k' - \frac{p'}{2}; E\right) \right] \frac{\mathcal{F}(k', p') dk' dp'}{\frac{k'^2}{m} + \frac{p'^2}{4m} - E - i\gamma}. \quad (5.3)$$

Теперь обратимся к формулам (3.18) и (3.13), дающим выражения соответственно для функций $T_0(k, p; k', p'; E)$ и $\tilde{T}_0(k, p)$. В приближении бесконечно малого радиуса действия сил функция $t(k, k', \varepsilon)$ — ядро оператора рассеяния частиц друг на друге — не зависит от k, k' (см. (9.18) гл. IV)

$$t(k, k'; \varepsilon) = t(\varepsilon) = \left[2\pi^2 m \left(\frac{\hbar}{\alpha} + i \sqrt{m(\varepsilon + i0)} \right) \right]^{-1}; \quad (5.4)$$

здесь α — длина рассеяния частиц друг на друге. В этом же предположении $\varphi_0(k)$ — волновая функция «дейтона» — имеет вид

$$\varphi_0(k) = N \left[\frac{k^2}{m} + |\varepsilon_d| \right]^{-1}, \quad N = \frac{1}{\pi m} \sqrt{\frac{\hbar}{\alpha}}, \quad \varepsilon_d = -\frac{\hbar^2}{m\alpha^2}, \quad (5.5)$$

где N — нормировочный множитель, ε_d — энергия связанного состояния «дейтона». С помощью всех этих

формул мы можем теперь выписать окончательные выражения для T_0 и \tilde{T}_0 :

$$T_0(k, p; k', p'; E) = T_0(p, p'; E) = \delta(p - p') \left[2\pi^2 m \left(\frac{\hbar}{\alpha} + i \sqrt{mE - p^2/4 - i0} \right) \right]^{-1}, \quad (5.6)$$

$$\tilde{T}_0(k, p) = \tilde{T}_0(p) = \delta(p - P) N.$$

Здесь P — импульс налетающей частицы:

$$E = \varepsilon_d + \frac{p^2}{4m}.$$

Так как в уравнении (5.3) \tilde{T}_0 и T_0 от k не зависят, не зависит от k и неизвестная функция $\mathcal{F}(k, p)$. Вводим новую функцию $a(p)$ с помощью соотношения

$$\mathcal{F}(k, p) \equiv \mathcal{F}(p) = N \left[\delta(p - P) - t \left(E - \frac{p^2}{4m} \right) a(p) \right]. \quad (5.7)$$

Подставляя это выражение для $\mathcal{F}(p)$ в (5.3), получаем уравнение для $a(p)$

$$a(p) = 2m [p^2 + pP + P^2/2 - mE - i0]^{-1} - \frac{2m}{N} \int \frac{t(E - p'^2/4m) a(p') dp'}{p^2 + pp' + p'^2/2 - mE - i0}. \quad (5.8)$$

Это и есть (с точностью до обозначений) уравнение Скорнякова — Тер-Мартиросяна для рассматриваемой задачи. Незвестная функция в этом уравнении зависит от одной трехмерной векторной переменной. Если разложить ее по парциальным волнам:

$$a(p) = \sum_L a_L(p) P_L(\cos \theta),$$

то из (5.8) легко получить расщепленные по L уравнения для каждой парциальной волны $a_L(p)$. Вычисления очень просты, поэтому мы не приводим ни их, ни уравнения для $a_L(p)$. Таким образом, рассматриваемая задача сводится к решению одномерных интегральных уравнений, что не составляет особого труда при использовании вычислительных машин.

Уравнения Скорнякова — Тер-Мартиросяна явились основой для решения ряда практических задач в системе трех нуклонов. Конкретные результаты можно

посмотреть в работах Г. В. Скорнякова (1956), Г. С. Данилова (1961).

Внимательный читатель, несомненно, заметил, к каким серьезным упрощениям привели два обстоятельства: 1) симметрия в ф. Ψ относительно перестановок координат частиц позволила систему трех уравнений Фаддеева (3.1) свести к одному уравнению для функции $\mathcal{T}(\mathbf{k}, \mathbf{p})$. Эта функция, правда, зависит от двух векторных переменных \mathbf{k} и \mathbf{p} , но здесь на помощь пришло 2) предположение о бесконечно малом радиусе сил между частицами. При этом исчезла зависимость от \mathbf{k} , и уравнение задачи свелось к уравнению Скорнякова — Тер-Мартиросяна для функции $a(\mathbf{p})$ одной векторной переменной \mathbf{p} .

В следующих параграфах будет рассмотрена более сложная ситуация, когда упрощения не столь радикальны, но тем не менее позволяют привести уравнения задачи трех тел к виду, удобному для анализа и позволяющему находить численные решения.

§ 6. Движение двух частиц во внешнем потенциальном поле. Обозначения и постановка задачи

Будем считать массу одной из частиц (пусть это будет частица 3) бесконечно большой: $m_3 \rightarrow \infty$. Тогда задача трех тел сводится к задаче о движении двух взаимодействующих друг с другом частиц (частицы 1 и 2) в поле неподвижного силового центра (обусловленного наличием частицы 3 с бесконечно большой массой) или, как мы будем в дальнейшем говорить, во внешнем потенциальном поле; оставим за ним для обозначения в формулах индекс 3.

К этой категории относится широкий класс задач, имеющих физический интерес, и только несколько из них решаются до конца в общем виде. Одной из них является задача о движении двух взаимодействующих частиц в общем гармоническом потенциале:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{r_2} + \frac{\omega_0^2}{2} (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) + v(|r_1 - r_2|) \right\} \Psi(r_1, r_2) = 0.$$

Переходя к новым переменным

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$

получаем уравнение с разделяющимися переменными

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m_{12}} \Delta_{\mathbf{r}} + \frac{\omega_0^2}{2} [M R^2 + m_{12} r^2] + v(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = 0.$$

Отсюда элементарно находим спектр энергии

$$E_{Nn} = \hbar \omega_0 \left(\frac{3}{2} + N \right) + \varepsilon_n, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.1)$$

где первый и второй члены — это собственные значения энергии гамильтонианов $\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} + \frac{M \omega_0^2}{2} R^2 \right)$ и $\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{12}} \Delta_{\mathbf{r}} + \frac{m_{12} \omega_0^2 r^2}{2} + v(\mathbf{r}) \right)$ соответственно.

Особенно просто все получается, если взаимодействие между частицами является осцилляторным $v(\mathbf{r}) = \frac{m_{12} \omega_1^2}{2} r^2$ или точечным. Первый случай совсем тривиален: ε_n в (6.1) равно $\varepsilon_n = \hbar \sqrt{\omega_1^2 + \omega_0^2} (3/2 + n)$, и общий спектр является наложением спектров двух трехмерных осцилляторов с частотами ω_0 и $\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$. Случай точечного взаимодействия между частицами чуть-чуть сложнее, и мы его предоставим разобрать читателю.

В только что приведенном примере удается сразу определить спектр энергий и, если бы мы захотели, волновую функцию. Это происходит из-за специфики гармонического осциллятора, так как в таком поле движения по координатам \mathbf{R} и \mathbf{r}_{12} не влияют друг на друга. В общем случае движения по этим координатам не независимы, и решение задачи сильно усложняется. При этом приходится использовать изложенную в предыдущих параграфах общую технику решения задачи трех тел. Она, правда, несколько видоизменяется в этом случае.

В качестве независимых переменных можно пользоваться векторами

$$\mathbf{k}_1 \text{ и } \mathbf{k}_2, \quad (6.2)$$

т. е. импульсами частиц 1 и 2 в лабораторной системе. Кроме того, можно использовать пару векторов

$$\mathbf{k}_{12} = \frac{m_2 \mathbf{k}_1 - m_1 \mathbf{k}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{p}_3 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad (6.2')$$

где вектор \mathbf{k}_{12} описывает относительное движение частиц 1 и 2, а \mathbf{p}_3 — движение их центра тяжести. В дальнейшем, в зависимости от обстоятельств, потребуются оба набора переменных (6.2) и (6.2'), но, как и раньше, если нет необходимости уточнять, какой из наборов используется для описания конфигурации частиц, мы будем писать \mathbf{k} и \mathbf{p} , понимая под ними либо \mathbf{k}_{12} и \mathbf{p}_3 , либо \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 .

Уравнение Шредингера для волновой функции Ψ системы из трех частиц запишем в виде

$$(H_0 + \hat{V}_{12} + \hat{V}_3 - E) \Psi[\mathbf{k}, \mathbf{p}] = 0,$$

где

$$H_0 = \frac{k_1^2}{2m_1} + \frac{k_2^2}{2m_2} = \frac{k_{12}^2}{2m_{12}} + \frac{p_3^2}{2m_3} \quad (m_3 = m_1 + m_2) \quad (6.3)$$

— гамильтониан свободного движения частиц 1 и 2, \hat{V}_{12} — оператор взаимодействия между ними, действие которого на волновую функцию определено в § 1 формулой (1.9), а

$$\hat{V}_3 = \hat{V}_{23} + \hat{V}_{31} \quad (6.4)$$

— оператор взаимодействия этих частиц с внешним потенциальным полем (частицей 3), действие которого на волновую функцию определяется аналогичной формулой, но в переменных \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 :

$$\begin{aligned} \hat{V}_3 \Psi[\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2] &= \int V_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) \Psi(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) d\mathbf{k}'_1 d\mathbf{k}'_2, \\ V_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) &= \\ &= v_{23}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2) \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) + v_{31}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2). \end{aligned} \quad (6.5)$$

В рамках задачи о движении двух взаимодействующих частиц во внешнем потенциальном поле можно исследовать процессы, происходящие при:

1) соударении связанного состояния двух частиц с внешним потенциальным полем, т. е. процессы:

$$\begin{aligned} \{1 \ 2\} + 3 &\rightarrow \{1 \ 2\} + 3 && \text{(упругое рассеяние),} \\ &\rightarrow \{1 \ 2\}^* + 3 && \text{(неупругое рассеяние),} \\ &\rightarrow \begin{cases} 2 + \{1 \ 3\} \\ 1 + \{2 \ 3\} \end{cases} && \text{(реакция «срыва»; одна} \\ &&& \text{из частиц захватывается} \\ &&& \text{внешним потенциальным} \\ &&& \text{полем, вторая улетает)} \\ &\rightarrow 1 + 2 + 3 && \text{(реакция развала связанного} \\ &&& \text{состояния во внешнем} \\ &&& \text{потенциальном поле).} \end{aligned} \quad (6.6)$$

2) столкновении одной из частиц (пусть это будет частица 1) с другой (частицей 2), находящейся на дискретном уровне внешнего потенциального поля, т. е. процессы:

$$\begin{aligned} 1 + \{2 \ 3\} &\rightarrow 1 + \{2 \ 3\} && \text{(упругое рассеяние),} \\ &\rightarrow 1 + \{2 \ 3\}^* && \text{(неупругое рассеяние),} \\ &\rightarrow 3 + \{1 \ 2\} && \text{(реакция «подхвата»: на} \\ &&& \text{летающая частица 1 под} \\ &&& \text{хватывает частицу 2, на} \\ &&& \text{ходящуюся на дискретном} \\ &&& \text{уровне внешнего потенци} \\ &&& \text{ального поля и при этом} \\ &&& \text{образуется связанное их} \\ &&& \text{состояние),} \\ &\rightarrow 1 + 2 + 3 && \text{(реакция выбивания ча} \\ &&& \text{стицы 2).} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Мы видели в начале этой главы, что когда все три частицы имеют конечную массу, амплитуды (сечения) всех процессов определяются из решения системы (3.11) трех интегральных уравнений (уравнений Фаддеева). Ясно, что эти же уравнения могут быть непосредственно использованы и сейчас без каких-либо их изменений,

если массу одной из трех частиц в этих уравнениях считать бесконечно большой. Однако предположение о наличии в системе одной частицы с бесконечно большой массой упрощает задачу и дает возможность так перестроить эти уравнения, что проблема отыскания амплитуд процессов сведется к решению системы, состоящей уже всего из двух интегральных уравнений, а не из трех. Чтобы осуществить такую перестройку, введем ф. Г. $G_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; E)$, отвечающую гамильтониану

$$\hat{H}_3 = \hat{H}_0 + \hat{V}_3 \quad (6.8)$$

взаимодействующих с внешним потенциальным полем частиц 1 и 2, но без учета их взаимодействия друг с другом:

$$(\hat{H}_3 - E) G_3[\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; E] = \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2). \quad (6.9)$$

Соответствующий оператор Грина есть

$$\hat{G}_3(E) = [\hat{H}_3 - (E + i\gamma)]^{-1}, \quad (6.10)$$

причем из (6.10) и из операторного тождества (1.18) следует:

$$\hat{G}_3 = \hat{G}_0 - \hat{G}_0 \hat{V}_3 \hat{G}_3. \quad (6.11)$$

Важным для нас свойством ф. Г. G_3 является возможность представить ее в виде (см. § 4, гл. IV)

$$\hat{G}_3(E) = \frac{1}{2\pi i} \int \hat{g}_{E-\varepsilon}^{(23)} g_{\varepsilon}^{(13)} d\varepsilon, \quad (6.12)$$

где $g^{(23)}$ и $g^{(13)}$ — функции Грина частиц 2 и 1 в поле частицы 3:

$$\left(\frac{k_1^2}{2m_1} + \hat{v}_{13} - \varepsilon \right) g^{(13)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \varepsilon) = \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1), \quad (6.13)$$

$$\left(\frac{k_2^2}{2m_2} + \hat{v}_{23} - (E - \varepsilon) \right) g^{(23)}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_2, E - \varepsilon) = \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2). \quad (6.13')$$

(Справедливость (6.12) легко проверяется подстановкой (6.12) в (6.9).) Таким образом, нахождение трехчастичной функции Грина G_3 сводится к решению простой за-

дачи о движении отдельной частицы во внешнем потенциальном поле, т. е. к решению уравнений (6.13) и (6.13') и последующему вычислению интеграла в формуле (6.12).

Такое существенное упрощение является следствием бесконечной массы $m_3 = \infty$. Благодаря этому обстоятельству частица 3 не испытывает отдачи при взаимодействии с частицами 1 и 2, и поэтому частицы 1 и 2 не влияют друг на друга. При конечной массе m_3 это было бы уже не так: частицы 1 и 2 влияли бы друг на друга даже при $V_{12} = 0$ через частицу 3 с помощью тривиального механизма: частица 1, действуя на 3, сдвигает последнюю, а та «тянет» за собой частицу 2, так что в результате движение частиц 1 и 2 оказывается связанным.

Другим важным для нас свойством ф. Г. в виде (6.12), является то, что в ней учтены условия излучения по двум парам координат: и по \mathbf{r}_{13} и \mathbf{r}_{23} . Это опять-таки является следствием бесконечной массы m_3 , благодаря чему частицы 1 и 2 движутся совершенно независимо друг от друга.

Теперь займемся непосредственно выводом уравнений движения двух частиц во внешнем потенциальном поле. Удобно снова исходить из уравнений Липпмана — Швингера для волновой функции системы трех частиц (мы сохраняем обозначения §§ 1 и 2)

$$\Psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = -i\gamma \hat{G}(E) \Phi_i^{(0)}[\mathbf{k}, \mathbf{p}], \quad (6.14)$$

которые были получены в § 2 (см. (2.9)) и куда входит полный оператор Грина:

$$G(E) = [\hat{H} - (E + i\gamma)]^{-1}.$$

В качестве волновой функции $\Phi_i^{(0)}$, характеризующей начальное состояние нашей системы, должна быть выбрана:

1) либо функция свободного движения частицы {1 2}, если нас интересуют процессы типа (6.6); эта функция имеет вид

$$\Phi_{\varepsilon_{12}, \mathbf{p}_3}^{(12)}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{p}_3) = \Phi_{\varepsilon_{12}}(\mathbf{k}_{12}) \delta(\mathbf{p}_3 - \mathbf{P}_3), \quad (6.15)$$

где $\Phi_{\varepsilon_{12}}$ — волновая функция связанного состояния частиц 1 и 2, ε_{12} — их энергия связи, а \mathbf{P}_3 — импульс свободного движения частицы {1 2} до столкновения;

2) либо функция

$$\Phi_{\varepsilon_{23}, K_1}^{(23)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{K}_1) \Phi_{\varepsilon_{23}}^{(23)}(\mathbf{k}_2), \quad (6.15')$$

если нас интересуют процессы типа (6.7), когда частица 1 с импульсом \mathbf{K}_1 сталкивается с частицей 2, находящейся на дискретном уровне внешнего потенциального поля (ε_{23} — энергия этого уровня, а его волновая функция $\Phi_{\varepsilon_{23}}(\mathbf{k}_2)$);

3) либо волновая функция свободного движения частиц 1 и 2, если нас интересуют процессы, происходящие при столкновении свободных частиц с внешним потенциальным полем.

Дальнейшее преобразование уравнения (6.14), как и в §§ 2, 3, связано с использованием различных представлений уравнения для полной ф. Г. \hat{G} . Нам понадобятся только два уравнения для полной ф. Г. \hat{G} , а именно:

$$\hat{G} = \hat{G}_3 - \hat{G}_3 \hat{V}_{12} \hat{G} \quad (6.16)$$

и

$$\hat{G} = \hat{G}_{12} - \hat{G}_{12} \hat{V}_3 \hat{G}. \quad (6.16')$$

В первом из них учтены условия излучения по координатам \mathbf{r}_{23} и \mathbf{r}_{13} , а во втором — по координате \mathbf{r}_{12} .

Рассмотрим сначала столкновение частицы {1 2} с внешним потенциальным полем. Функция $\Phi_i^{(0)}$ в уравнении (6.14) в этом случае должна быть выбрана в виде (6.15). Подставляя далее поочередно в уравнение (6.14) ф. Г. \hat{G} , представленную в виде (6.16) и (6.16'), и затем используя приемы, аналогичные тем, которые вели нас в §§ 2 и 3 от уравнения (2.9) к уравнениям (3.1a) — (3.1b), находим, что точная волновая функция $\Psi_{\varepsilon_{12}, \mathbf{P}_3}$, описывающая столкновение частицы {1 2} с внешним потенциальным полем, является решением уравнений

$$\Psi_{\varepsilon_{12}, \mathbf{P}_3} = \Phi_{\varepsilon_{12}, \mathbf{P}_3}^{(12)} - \hat{G}_{12} \hat{V}_3 \Psi_{\varepsilon_{12}, \mathbf{P}_3}, \quad (6.17)$$

$$\Psi_{\varepsilon_{13}, \mathbf{P}_3} = -\hat{G}_3 \hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{13}, \mathbf{P}_3}. \quad (6.18)$$

Следует указать, что при этом мы воспользовались соотношением (2.11) и соотношением

$$i\gamma \hat{G}_3 \Phi_{\varepsilon_{12}, \mathbf{P}_3}^{(12)} = 0 \quad \text{при } \gamma \rightarrow 0,$$

которое следует из тех же соображений, что и (2.11).

В § 3 подробно обсуждался вопрос об однозначности решения интегральных уравнений задачи трех тел с конечными массами. Все соображения общего характера, которые там были при этом высказаны, применимы, конечно, и к уравнениям (6.17) и (6.18): каждое из уравнений (6.17) и (6.18), взятое в отдельности, не гарантирует однозначности решения рассматриваемой задачи, так как в этом случае не удастся учесть все необходимые для этого условия задачи.

Однако взятая в совокупности, пара уравнений (6.17), (6.18) учитывает все граничные условия: в уравнении (6.17) \hat{G}_{12} учитывает «условие излучения» по координате \mathbf{r}_{12} относительного движения частиц 1 и 2. В уравнении же (6.18) учтены целых два условия излучения: по координатам \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . Этого удастся достигнуть благодаря тому, что G_3 при $m_3 \rightarrow \infty$ может быть представлена в виде (6.12), который обеспечивает существование только расходящихся волн частиц 1 и 2. Именно в этом проявляется эффект бесконечной массы частицы 3 (отсутствие отдачи).

Совершенно аналогичная ситуация возникает и при решении задачи о столкновении частицы 1 с частицей 2, связанной во внешнем поле V_{23} . Волновая функция $\Psi_{\varepsilon_{23}, K_1}$, которая отвечает этому случаю, является решением уравнений

$$\Psi_{\varepsilon_{23}, K_1} = -\hat{G}_{12} \hat{V}_3 \Psi_{\varepsilon_{23}, K_1}, \quad (6.19)$$

$$\Psi_{\varepsilon_{23}, K_1} = \Phi_{\varepsilon_{23}, K_1} - \hat{G}_3 \hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{23}, K_1}, \quad (6.20)$$

где Φ_{K_1} — волновая функция, описывающая рассеяние частицы 1 на внешнем потенциальном поле в отсутствие частицы 2.

Уравнения (6.19) и (6.20) получены тем же способом, что и уравнения (6.17) и (6.18) с учетом условия

$$i\gamma \hat{G}_{12} \Phi_{\varepsilon_{23}}(\mathbf{k}_2) \Phi_{K_1}(\mathbf{k}_1) = 0,$$

$$i\gamma \hat{G}_{3\Phi_{\varepsilon_{23}}}(\mathbf{k}_2) \Phi_{K_1}(\mathbf{k}_1) = -\Phi_{\varepsilon_{23}}(\mathbf{k}_2) \Phi_{K_1}(\mathbf{k}_1) \text{ при } \gamma \rightarrow 0.$$

Как и в предыдущем случае, для однозначного решения задачи о столкновении одной частицы с другой, находящейся на дискретном уровне потенциального поля, необходимо использовать оба уравнения (6.19) и (6.20) и искать совместное их решение.

§ 7. Формулы для нахождения амплитуд различных процессов

Конечной целью исследования любой реакции является вычисление ее амплитуды. Вычислению амплитуд реакций (6.6) и (6.7), которые можно описать в рамках задачи движения двух частиц во внешнем потенциальном поле, и посвящен этот параграф.

Согласно формуле (4.3) амплитуды реакций (6.6) запишем в виде

$$\mathcal{T}_{\text{упр}} = - \left\langle \Phi_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)}, \hat{V}_3 \Psi_{\varepsilon_{12}P^{(i)}} \right\rangle, \quad (7.1a)$$

$$\mathcal{T}_{\text{срыв}} = - \left\langle \Phi_{\varepsilon_{13}K_2}^{(-)} \Phi_{K_1}^{(-)}, \hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{12}P_3^{(i)}} \right\rangle, \quad (7.1б)$$

$$\mathcal{T}_{\text{разв}} = - \left\langle \Phi_{K_1}^{(-)} \Phi_{K_2}^{(-)}, \hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{12}P_3^{(i)}} \right\rangle \quad (7.1в)$$

и т. д. Здесь $\Psi_{\varepsilon_{12}P_3^{(i)}}$ — точная волновая функция, характеризующая столкновение частиц 1 и 2 в связанном состоянии (как и обычно будем называть это связанное состояние частицей {1 2}) с внешним потенциальным полем, которая должна быть найдена, как было показано в предыдущем параграфе, из совместного решения уравнений (6.17), (6.18); $\Phi_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)}$ — волновая функция свободного движения частицы {1 2} после упругого рассеяния ($\varepsilon_{12}^{(i)} = \varepsilon_{12}^{(f)}$), $\Phi_{\varepsilon_{13}K_2}^{(-)}$ — волновая функция, характеризующая связанное состояние частицы 1 во внешнем по-

тенциальном поле \hat{V}_{13} ($\varepsilon_{13}^{(f)}$ — ее энергия); $\Phi_{K_2}^{(-)}$ ($\Phi_{K_1}^{(-)}$) — волновая функция, отвечающая непрерывному спектру значений энергии $K_2^{(f)2}/2m_2$ ($K_1^{(f)2}/2m$) частицы 2 (1) во внешнем потенциальном поле \hat{V}_{23} (\hat{V}_{13}), удовлетворяющая соответствующим конечному состоянию граничным условиям: плоская волна плюс сходящаяся. Так как в реакциях выполняется закон сохранения энергии, то кинематика рассматриваемых реакций определяется соотношениями, которые соответственно для матричных элементов (7.1a) — (7.1в) имеют вид

$$E = \varepsilon_{12}^{(i)} + \frac{p^{(i)2}}{2n_3} = \varepsilon_{12}^{(f)} + \frac{p^{(f)2}}{2n_3}, \quad (7.2a)$$

$$E = \varepsilon_{12}^{(i)} + \frac{p^{(i)2}}{2n_3} = \varepsilon_{13}^{(f)} + \frac{K^{(f)2}}{2m_2}, \quad (7.2б)$$

$$E = \varepsilon_{12}^{(i)} + \frac{p^{(i)2}}{2n_3} = \frac{K_1^{(f)2}}{2m_1} + \frac{K_2^{(f)2}}{2m_2}. \quad (7.2в)$$

Наконец, дифференциальные сечения рассматриваемых реакций, согласно формуле (4.6), выражаются через соответствующие этим реакциям амплитуды (7.1a) — (7.1в), следующим образом:

$$\frac{d\sigma_{\text{упр}}}{d\Omega} = (2\pi)^4 \hbar^2 n_3^2 |\mathcal{T}_{\text{упр}}|^2 d\Omega_{P_3}, \quad (7.2г)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{срыв}}}{d\Omega} = (2\pi)^4 \hbar^2 n_2 n_3 \frac{P_2}{P_3} |\mathcal{T}_{\text{срыв}}|^2 d\Omega_{P_2}, \quad (7.2д)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{разв}}}{d\Omega} = \frac{(2\pi\hbar)^4 \hbar^2}{v_3} |\mathcal{T}_{\text{разв}}|^2 \delta \left[E - \left(\frac{p^2}{2n} + \frac{\hbar^2}{2m} \right) \right] dk dp. \quad (7.2e)$$

Амплитуды реакций (6.7) запишутся соответственно в виде

$$\mathcal{T}_{\text{расс}} = - \left\langle \Phi_{\varepsilon_{23}K_1}^{(-)} \Phi_{K_1}^{(-)}, \hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{23}K_1^{(i)}} \right\rangle, \quad (7.3a)$$

$$\mathcal{T}_{\text{подхв}} = - \left\langle \Phi_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)}, \hat{V}_3 \Psi_{\varepsilon_{23}K_1^{(i)}} \right\rangle, \quad (7.3б)$$

$$\mathcal{T}_{\text{выб}} = - \left\langle \Phi_{K_1}^{(-)} \Phi_{K_2}^{(-)}, \hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{23}K_1^{(i)}} \right\rangle \quad (7.3в)$$

и т. д. Здесь $\Psi_{\varepsilon_{23}^{(i)} K_1^{(i)}}$ — точная волновая функция задачи столкновения частицы 1 с частицей 2, находящейся на дискретном уровне внешнего потенциального поля, удовлетворяющая уравнениям (6.19) и (6.20), а обозначения для волновых функций, характеризующих состояния, которые возникли в результате реакций, аналогичны обозначениям, использованным для соответствующих целей в предыдущем случае.

Кинематика данных реакций определяется соотношениями, которые соответственно для матричных элементов (7.3а) — (7.3в) имеют вид

$$E = \varepsilon_{23}^{(i)} + \frac{K_1^{(i)^2}}{2m_1} = \varepsilon_{23}^{(f)} + \frac{K_1^{(f)^2}}{2m_1},$$

$$E = \varepsilon_{23}^{(i)} + \frac{K_1^{(i)^2}}{2m_1} = \varepsilon_{12}^{(f)} + \frac{P_3^{(f)^2}}{2m_3},$$

$$E = \varepsilon_{23}^{(i)} + \frac{K_1^{(i)^2}}{2m_1} = \frac{K_1^{(f)^2}}{2m_1} + \frac{K_2^{(f)^2}}{2m_2},$$

а дифференциальные сечения этих реакций, согласно (5.6), связаны с соответствующими этим реакциям амплитудами (7.3а) — (7.3в) следующим образом:

$$\frac{d\sigma_{\text{расс}}}{d\Omega} = (2\pi)^4 \hbar^2 |\mathcal{F}_{\text{расс}}|^2 m_1^2 d\Omega_{K_1^{(f)}}, \quad (7.3г)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{подхв}}}{d\Omega} = (2\pi)^4 \hbar^2 |\mathcal{F}_{\text{подхв}}|^2 m_1 (m_1 + m_2) \frac{P_3}{K_1^{(i)}} d\Omega_{P_3}, \quad (7.3д)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{выб}}}{d\Omega} = \frac{(2\pi\hbar)^4 \hbar^2}{v_1} |\mathcal{F}_{\text{выб}}|^2 \delta \left[E - \left(\frac{K_1^{(f)^2}}{2m_1} + \frac{K_2^{(f)^2}}{2m_2} \right) \right] dK_1^{(f)} dK_2^{(f)}. \quad (7.3е)$$

Как и в §§ 3, 4 этой главы для вычисления этих амплитуд удобнее использовать не волновую функцию Ψ_i , а величины

$$T^{(12)} = \hat{V}_{12} \Psi_i, \quad T^{(3)} = \hat{V}_3 \Psi_i. \quad (7.4)$$

Поэтому перейдем от уравнений для волновых функций Ψ_i к уравнениям непосредственно для этих величин.

Сначала рассмотрим процесс соударения частицы {1 2} с внешним потенциальным полем. Умножим в опе-

раторном смысле уравнения (6.17) и (6.18), характеризующие этот процесс, соответственно на \hat{V}_{12} и \hat{V}_3 . Далее, воспользовавшись определением (3.12) для оператора T_{12} , введенного в § 4, находим, что уравнения (6.17) и (6.18) для волновой функции $\Psi_{\varepsilon_{12}^{(i)} P_3^{(i)}}$, описывающей

рассматриваемый процесс, переходит в систему двух зацепляющихся интегральных уравнений для функций $T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(12)}$ и $T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(3)}$

$$T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(12)} = \hat{V}_{12} \Phi_{\varepsilon_{12}^{(i)} P_3^{(i)}} - \hat{T}_{12} G_0 T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(3)}, \quad (7.5а)$$

$$T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(3)} = -\hat{V}_3 \hat{G}_3 T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(12)}. \quad (7.5б)$$

Эта система тривиально расщепляется подстановкой, например, уравнения (7.5б) в (7.5а)

$$T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(12)} = \hat{V}_{12} \Phi_{\varepsilon_{12}^{(i)} P_3^{(i)}} + \hat{T}_{12} G_0 \hat{V}_3 G_3 T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(12)}. \quad (7.6)$$

Совершенно очевидно, что можно было бы расщепить систему и с помощью подстановки (7.5а) в (7.5б). Тогда бы мы пришли к уравнению для $T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(3)}$. Однако удобнее воспользоваться первым способом, так как он окажется предпочтительным для дальнейших целей. Представим окончательно уравнение (7.6) в виде

$$T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(12)} = \hat{V}_{12} \Phi_{\varepsilon_{12}^{(i)} P_3^{(i)}} - \hat{T}_{12} \Delta \hat{G}_3 T_{\varepsilon_{12} P_3}^{(12)}, \quad (7.7)$$

где

$$\Delta \hat{G}_3 = \hat{G}_3 - \hat{G}_0 = -\hat{G}_0 \hat{V}_3 \hat{G}_3. \quad (7.8)$$

Укажем, наконец, что первый член в правой части уравнения (7.7) можно записать в виде

$$\hat{V}_{12} \Phi_{\varepsilon_{12}^{(i)} P_3^{(i)}} = - \left\{ \frac{k_{12}^2}{2m_{12}} + \frac{p_3^2}{2m_3} - E \right\} \Phi_{\varepsilon_{12}^{(i)}}(\mathbf{k}_{12}) \delta(\mathbf{p}_3 - \mathbf{P}_3^{(i)}). \quad (7.9)$$

Это соотношение выведено здесь тем же способом, что и соотношение (3.13).

Теперь перейдем к задаче столкновения частицы 1 с частицей 2, находящейся на дискретном уровне внешнего потенциального поля, и сделаем те же преобразования, что и в предыдущем случае, т. е. умножим

в операторном смысле уравнения (6.19) и (6.20) для волновой функции $\Psi_{\varepsilon_{23}K_1}^{(i)}$, описывающие этот процесс,

соответственно на операторы \hat{V}_{12} и \hat{V}_3 ; приходим к системе из двух зацепляющихся интегральных уравнений для функции $T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)}$ и $T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(3)}$:

$$T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)} = -\hat{T}_{12}\hat{G}_0T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(3)}, \quad (7.10a)$$

$$T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(3)} = \hat{V}_3\Phi_{\varepsilon_{23}}^{(i)}\Phi_{K_1}^{(i)} - \hat{V}_3\hat{G}_3T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)}. \quad (7.10б)$$

Эта система тривиально расщепляется подстановкой одного из уравнений в другое. Для дальнейшего удобнее это сделать подстановкой (7.10б) в (7.10а). После простых преобразований находим, что система интегральных уравнений (7.10а) и (7.10б) сводится к одному интегральному уравнению для функции $T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)}$:

$$T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)} = T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(0)} - \hat{T}_{12}\Delta G_3T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)}, \quad (7.11)$$

где

$$T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(0)} = -\hat{T}_{12}\hat{G}_0\hat{V}_3\Phi_{\varepsilon_{23}}^{(i)}\Phi_{K_1}^{(i)} = \hat{T}_{12}\Phi_{\varepsilon_{23}}^{(i)}\Phi_{K_1}^{(i)}. \quad (7.12)$$

Отметим, что при выводе как этой системы интегральных уравнений, так и системы (7.5) были использованы оба интегральных уравнения (6.17), (6.18), необходимых для однозначного определения волновой функции интересующего нас процесса. Поэтому полученные системы (7.5) и (7.10) уже автоматически оказываются однозначно разрешимыми.

Теперь нам остается показать, как амплитуды реакций, которые здесь рассматриваются, выражаются либо через решение интегрального уравнения (7.7), либо через решение интегрального уравнения (7.11) в зависимости от того, какой из исследуемых процессов рассматривается. Для этого, воспользовавшись выражениями (7.1а)—(7.1в) для амплитуд реакций (6.6), которые возможны при взаимодействии частицы {1 2} с внешним потенциальным полем, определением (7.4) величин $T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)}$ и $T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(3)}$, операторным тождеством

$$\hat{V}_3\hat{G}_3 = \hat{G}_0^{-1}\hat{G}_0\hat{V}_3\hat{G}_3 = -\hat{G}_0^{-1}\Delta\hat{G}_3 \quad (7.13)$$

и, наконец, формулами (7.5б) и (7.9) находим, что эти амплитуды выражаются через решение $T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)}$ уравнения (7.7) следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\text{упр}} &= \langle \Phi_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)(f)}, \hat{G}_0^{-1}\Delta\hat{G}_3T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)} \rangle = \langle \hat{G}_0^{-1}\Phi_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)(f)}, \Delta\hat{G}_3T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)} \rangle = \\ &= -\langle \hat{V}_{12}\Phi_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)(f)}, \Delta\hat{G}_3T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)} \rangle, \end{aligned} \quad (7.14a)$$

$$\mathcal{T}_{\text{срыв}} = -\langle \Phi_{\varepsilon_{13}K_2}^{(-)}\Phi_{K_2}^{(-)}, T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)} \rangle, \quad (7.14б)$$

$$\mathcal{T}_{\text{разв}} = -\langle \Phi_{K_1}^{(-)}\Phi_{K_2}^{(-)}, T_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)} \rangle. \quad (7.14в)$$

Аналогичным образом находим и соотношения, связывающие амплитуды реакций (6.7) (возможных при столкновении частицы 1 с частицей 2, находящейся на дискретном уровне внешнего потенциального поля) с решением $T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)}$ уравнения (7.11). Они имеют вид

$$\mathcal{T}_{\text{расс}} = -\langle \Phi_{\varepsilon_{23}K_1}^{(f)}\Phi_{K_1}^{(-)}, T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)} \rangle, \quad (7.15a)$$

$$\mathcal{T}_{\text{подхв}} = -\langle \hat{V}_{12}\Phi_{\varepsilon_{12}P_3}^{(12)(f)}, \Phi_{\varepsilon_{23}K_1}^{(i)}\Phi_{K_1}^{(i)} - \Delta\hat{G}_3T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)} \rangle, \quad (7.15б)$$

$$\mathcal{T}_{\text{выб}} = -\langle \Phi_{K_1}^{(-)}\Phi_{K_2}^{(-)}, T_{\varepsilon_{23}K_1}^{(12)} \rangle. \quad (7.15в)$$

Итак, в этом параграфе мы показали, что решение частного случая задачи трех тел, а именно задачи о движении двух взаимодействующих друг с другом частиц во внешнем поле, сводится к решению одного интегрального уравнения, зависящего, вообще говоря, от двух трехмерных переменных.

§ 8. Две частицы во внешнем поле. Случай точечного взаимодействия между частицами

В случае, когда между частицами 1 и 2 действуют точечные силы (§ 9 гл. IV), функция T_{12} , входящая в уравнения движения двух частиц в поле (уравнения

(7.7) и (7.11)), имеет вид

$$T_{12}(k_{12}, p_3; k'_{12}, p'_3; E) \equiv t_{12} \left(k_{12}, k'_{12}; E - \frac{p_3^2}{2n_3} \right) \delta(p_3 - p'_3) = \frac{\delta(p_3 - p'_3)}{4\pi^2 m_{12} \left[\frac{\hbar}{\alpha} + i \sqrt{2m_{12} \left(E - \frac{p_3^2}{2n_3} \right)} \right]}. \quad (8.1)$$

Это выражение непосредственно следует из (9.18) гл. IV. Важным для нас свойством точечного взаимодействия является то, что T_{12} в этом случае не зависит от векторных переменных k_{12} и k'_{12} . Именно это обстоятельство мы и используем для существенного упрощения общих уравнений предыдущего параграфа, где вид взаимодействия между частицами 1 и 2 не конкретизировался.

Со случаем точечного взаимодействия мы уже сталкивались раньше, последний раз — в § 5 этой главы при выводе уравнения Скорнякова — Тер-Мартirosяна. Ниже мы будем пользоваться теми же обозначениями, что и в § 5 этой главы и в § 9 гл. IV.

Будем считать, что длина рассеяния (α) частиц 1 и 2 друг на друге положительна, так что существует связанное состояние $\{1\ 2\}$ этих частиц (дейтон). Волновая функция дейтона есть

$$\Phi_{\varepsilon_{12}}(k_{12}) = \frac{N}{\frac{k_{12}^2}{2m_{12}} - \varepsilon_{12}}; \quad N = \frac{\sqrt{\hbar}}{2\pi m_{12} \sqrt{\alpha}}, \quad (8.2)$$

а его энергия

$$\varepsilon_{12} = - \frac{\hbar^2}{2m_{12}\alpha^2}. \quad (8.3)$$

Будем называть частицы 1 и 2 нуклонами. В этом случае предположение о бесконечно малом радиусе действия ядерных сил между нуклонами является обоснованным приближением при условии не слишком большой энергии относительного движения этих нуклонов.

Цель настоящего параграфа — рассмотреть задачу о движении двух нуклонов во внешнем потенциальном поле. При этом, хотя взаимодействие нуклонов друг с другом предполагается точечным, форма внешнего потенциального поля может быть произвольной.

Рассмотрим сначала задачу столкновения дейтона с внешним полем. В общем случае решение этой задачи сводится к решению интегрального уравнения (7.7). Посмотрим, как видоизменится это уравнение в нашем случае. Для этой цели удобно преобразовать выражение (8.1), используя тот факт, что полная энергия E может быть представлена в виде суммы кинетической энергии налетающего дейтона $P_{3i}^2/2n_3$ и его энергии связи (для удобства введем обозначение $\varepsilon_d = -\varepsilon_{12} > 0$):

$$E = -\varepsilon_d + \frac{1}{2n_3} P_{3i}^2. \quad (8.4)$$

С помощью (8.4) представим (8.1) в виде

$$T_{12} = 2n_3 N^2 \frac{\chi_E(p_3) \delta(p_3 - p'_3)}{P_{3i}^2 - p_3^2 + i\gamma}, \quad (8.5)$$

где

$$\chi_E(p_3) = \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon_d} \left(E - \frac{p_3^2}{2n_3} \right)} \quad (8.6)$$

есть безразмерная функция от p_3 . Учитывая далее, что волновая функция дейтона $\Phi_{\varepsilon_{12}}$ дается уравнением (8.2), находим с помощью (7.9)

$$\hat{V}_{12} \Phi_{\varepsilon_{12} P_{3i}} = -N \delta(p_3 - P_{3i}), \quad (8.7)$$

где P_{3i} — импульс налетающего дейтона.

Подставив теперь (8.5) и (8.7) в общее уравнение (7.7), получаем, что функция $T_{\varepsilon_{12} P_{3i}}^{(12)}$ не зависит от k_{12} и может быть записана в следующем виде:

$$T_{\varepsilon_{12} P_{3i}}^{(12)} = -N \Omega_{P_{3i}}(p_3), \quad (8.8)$$

где

$$\Omega_{P_{3i}}(p_3) = \delta(p_3 - P_{3i}) - \frac{\mathcal{T}(p_3, P_{3i})}{\frac{1}{2n_3}(p_3^2 - P_{3i}^2) - i\gamma}, \quad (8.9)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(p_3, P_{3i}) &= \int U_E(p_3, p_3') \Omega_{P_{3i}}(p_3') dp_3' = \\ &= U_E(p_3, P_{3i}) - \int \frac{U_E(p_3, p_3') \mathcal{T}(p_3', P_{3i}) dp_3'}{\frac{1}{2n_3}(p_3'^2 - P_{3i}^2) - i\gamma}, \quad (8.10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_E(p_3, p_3) &\equiv \\ &\equiv -N^2 \chi(p_3) \int \Delta G_3(p_3 - k_2, k_2; p_3' - k_2', k_2'; E) dk_2 dk_2'. \quad (8.11) \end{aligned}$$

То, что в уравнения (8.8) — (8.11) не входит импульс k_{12} , является прямым следствием независимости двух-частичного оператора рассеяния \hat{t}_{12} от k_{12} . Введенные здесь функции Ω , \mathcal{T} и U_E , как будет видно ниже, имеют простой физический смысл. Заметим прежде всего, что входящую в (8.8) функцию

$$T_{\varepsilon_{12} P_{3i}}^{(12)} \equiv \hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{12} P_{3i}}(k_1, k_2) = -N \Omega_{P_{3i}}(p_3) \quad (8.8')$$

можно рассматривать как волновую функцию центра тяжести частиц 1 и 2. Действительно, переходя в координатное представление, имеем

$$\hat{V}_{12} \Psi_{\varepsilon_{12} P_{3i}}(k_1, k_2) \rightarrow v_{12}(r_1 - r_2) \Psi_{\varepsilon_{12} P_{3i}}(r_1, r_2). \quad (8.12)$$

Так как v_{12} по условию является точечным потенциалом, отличным от нуля лишь при $r_1 = r_2$, то правая часть (8.12) пропорциональна значению точной волновой функции задачи $\psi(r_1, r_2)$ при совпадающих значениях переменных $r_1 = r_2 = R$ (R — координата центра тяжести частиц 1 и 2). Поэтому введенную в (8.8) функцию $\Omega_{P_{3i}}(p_3)$ можно рассматривать как записанную в импульсном представлении волновую функцию центра тяжести частиц 1 и 2.

Обратим теперь внимание на то, что система уравнений (8.9), (8.10) по форме совпадает с уравнением

Шредингера, описывающим в импульсном представлении рассеяние одной частицы с массой $n_3 = m_1 + m_2$ на потенциале U_E . При этом Ω играет роль волновой функции частицы, \mathcal{T} — роль ее оператора рассеяния (см. формулы § 6 гл. IV), а потенциал U_E задается равенством (8.11).

Таким образом, мы приходим к нетривиальному выводу, что в случае точечного взаимодействия между частицами 1 и 2 движение по координате центра тяжести этих частиц строго отделяется даже в присутствии внешнего поля; движение центра тяжести описывается одно-частичным уравнением Шредингера (8.10).

Анализ, который мы здесь приводить не будем, показывает, что такое отделение центра тяжести частиц 1 и 2 возможно и в случае неточечных взаимодействий между ними. Но в этом последнем случае отделение будет не строгим, а приближенным. Поправочные члены будут иметь относительный порядок величины r_0/ρ , где r_0 — радиус взаимодействия v_{12} , а ρ — радиус действия внешнего поля (т. е. потенциалов U_{13} и U_{23}).

Теперь установим связь между амплитудами реакций, которые возможны при взаимодействии дейтона с потенциальным полем (см. (6.6)), и функцией Ω . Для этого воспользуемся соотношениями (7.14а) — (7.14в), полученными в предыдущем параграфе и определяющими эти амплитуды через $T_{\varepsilon_{12} P_{3i}}^{(12)}$. Подстановкой (8.8) в (7.14а) — (7.14в) и с помощью (8.7) легко находим:

$$\mathcal{T}_{\text{упр}} = \mathcal{T}(p_3, P_{3i})|_{p_3 = P_{3i}}, \quad (8.13)$$

$$\mathcal{T}_{\text{срыв}} = N \int \Phi_{\varepsilon_{13}}^*(k_1) \Phi_{K_{2f}}^{(-)*}(p_3 - k_1) \Omega_{P_{3i}}(p_3) dp_3 dk_1, \quad (8.14)$$

$$\mathcal{T}_{\text{разв}} = N \int \Phi_{K_{1f}}^{(-)*}(k_1) \Phi_{K_{2f}}^{(-)*}(p_3 - k_1) \Omega_{P_{3i}}(p_3) dp_3 dk_1. \quad (8.15)$$

В этих формулах P_{3i} , K_{1f} и K_{2f} — импульсы в конечном состоянии дейтона, первой частицы и второй частицы соответственно; $\Phi_{\varepsilon_{13}}$ — волновая функция связанного состояния частицы 1 во внешнем поле, заселяемого в реакции срыва.

Из выписанных выше формул для амплитуд видно, что в рамках сделанных в начале этого параграфа

предположений решение задачи трех тел сводится к решению последовательности более простых задач о движении одной частицы в заданном потенциале: частица 1 — в потенциале U_{13} , частица 2 — в потенциале U_{23} и, наконец, частица {1 2} в потенциале U_E , задаваемом формулой (8.11). Отметим также, что амплитуда рассеяния дейтона совпадает с величиной \mathcal{T} . Согласно данной несколько выше интерпретации функции Ω так и должно быть, так как, согласно определениям, величина \mathcal{T} имеет смысл одночастичного оператора рассеяния, соответствующего функции Ω .

Соотношения (8.8) — (8.15) исчерпывают задачу о столкновении дейтона с внешним полем. Сейчас мы рассмотрим другой класс задач, возникающих при попытке описать процесс соударения частицы 1 с частицей 2, находящейся на одном из дискретных уровней внешнего поля.

Уравнение, описывающее этот класс задач, было выведено в предыдущем параграфе (см. (7.11), (7.12)). В развернутом виде это уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} T_{\varepsilon_{23}, K_{1i}}^{(12)}(\mathbf{p}_3) &= \hat{T}_{12} \{ \Phi_{\varepsilon_{23}} \Phi_{K_{1i}} - \Delta \hat{G}_3 T_{\varepsilon_{23}, K_{1i}}^{(12)} \} = \\ &= \int T_{12}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{p}_3; \mathbf{k}'_{12}, \mathbf{p}'_3; E) d\mathbf{p}'_3 d\mathbf{k}'_{12} \left\{ \Phi_{\varepsilon_{23}}(\mathbf{k}'_2) \Phi_{K_{1i}}(\mathbf{k}'_1) - \right. \\ &\left. - \int d\mathbf{k}''_2 d\mathbf{k}''_1 \Delta G_3(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; \mathbf{k}''_1, \mathbf{k}''_2; E) T_{\varepsilon_{23}, K_{1i}}^{(12)}(\mathbf{p}''_3) \right\}. \quad (8.16) \end{aligned}$$

Искомая функция $T^{(12)}$ зависит только от одного векторного аргумента \mathbf{p}_3 , так как из-за точности взаимодействия \hat{v}_{12} правая часть этого уравнения не зависит от \mathbf{k}_{12} (см. (8.1)). Оператор рассеяния \hat{T}_{12} в нашем случае удобно представить, используя введенные выше обозначения, в виде

$$T_{12}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{p}_3; \mathbf{k}'_{12}, \mathbf{p}'_3; E) = 2n_3 N^2 \frac{\chi(\mathbf{p}_3) \delta(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}'_3)}{2n_3(E + \varepsilon_d) - p_3^2 + i\gamma}. \quad (8.17)$$

Отсюда видно, что функцию $T_{\varepsilon_{23}, K_{1i}}^{(12)}$ удобно искать в форме

$$T_{\varepsilon_{23}, K_{1i}}^{(12)}(\mathbf{p}_3) = 2n_3 N^2 \frac{\chi(\mathbf{p}_3)}{2n_3(E + \varepsilon_d) - p_3^2 + i\gamma} \Phi(\mathbf{p}_3). \quad (8.18)$$

Подстановка (8.17), (8.18) в (8.16) приводит к уравнению

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{p}_3) &= \int \Phi_{\varepsilon_{23}}(\mathbf{p}_3 - \mathbf{k}_1) \Phi_{K_{1i}}(\mathbf{k}_1) d\mathbf{k}_1 - \\ &- \int \frac{\tilde{U}_E(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}'_3) \Phi(\mathbf{p}'_3) d\mathbf{p}'_3}{\frac{p_3^2}{2n_3} - (E + \varepsilon_d + i\gamma)}, \quad (8.19) \end{aligned}$$

где $\Phi_{\varepsilon_{23}}$ и $\Phi_{K_{1i}}$ — волновые функции начального состояния, связанного состояния частицы 2 во внешнем поле и налетающей на внешнее поле с импульсом K_{1i} частицы 1 соответственно. Это уравнение имеет вид уравнения Шредингера для одной частицы в потенциале \tilde{U} , причем последний задается формулой

$$\begin{aligned} \tilde{U}_E(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}'_3) &= \\ &= -N^2 \left\{ \int \Delta G_3(\mathbf{p}_3 - \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2; \mathbf{p}'_3 - \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_2; E) d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}'_2 \right\} \chi(\mathbf{p}'_3). \quad (8.20) \end{aligned}$$

Обратим внимание на тесную связь этого потенциала с потенциалом $U_E(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}'_3)$ в формуле (8.11):

$$\tilde{U}_E(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}'_3) = U_E(\mathbf{p}'_3, \mathbf{p}_3). \quad (8.20')$$

Само уравнение (8.19), с другой стороны, отличается от стандартной формы у.Ш. для задачи о рассеянии только тем, что в качестве свободного члена в (8.19) стоит гладкая функция \mathbf{p}_3 , а не δ -функция. Это обстоятельство и существование соотношения (8.20') делает почти очевидным тот факт, что введенная нами только что функция Φ должна просто выражаться через рассматривавшуюся в начале этого параграфа волновую функцию Ω центра тяжести частиц 1 и 2. Мы не будем здесь на этом дальше останавливаться, предотвратив вывод соответствующих формул связи читателю.

В заключение этого параграфа приведем формулы для амплитуд всех возможных процессов (6.7), происходящих при столкновении частицы 1 со связанным состоянием частицы 2 во внешнем поле. Используя

(7.15a) — (7.15в), легко получаем

$$\mathcal{T}_{\text{расс}}(K_{1f}, K_{1i}) = -N^2 \int \frac{\Phi_{e_{23}}^*(p_3 - k_1) \Phi_{K_{1f}}^{(-)*}(k_1) \chi(p_3) \Phi(p_3)}{\frac{p_3^2}{2n_3} - (E + \varepsilon_d + i\gamma)} dp_3 dk_1, \quad (8.21)$$

$$\mathcal{T}_{\text{выб}}(K_{1f}, K_{2f}; K_{1i}) = -N^2 \int \frac{\Phi_{K_{2f}}^{(-)*}(p_3 - k_1) \Phi_{K_{1f}}^{(-)*}(k_1) \chi(p_3) \Phi(p_3)}{\frac{p_3^2}{2n_3} - (E + \varepsilon_d + i\gamma)} dp_3 dk_1, \quad (8.22)$$

$$\mathcal{T}_{\text{подхв}}(P_{3f}, K_{1i}) = N\Phi(P_{3f}). \quad (8.23)$$

В обозначениях § 6 процесс подхвата $1 + \{23\} \rightarrow \{12\} + 3$ является обратным по отношению к процессу срыва $\{12\} + 3 \rightarrow 1 + \{23\}$. Согласно самым общим теоремам квантовой механики амплитуды этих процессов, (8.23) и (8.14) соответственно, должны быть просто связаны друг с другом (см. параграф об обратимости времени в гл. VIII). Такая связь действительно существует, но чтобы сделать ее очевидной, надо выражать функцию Φ в (8.23) через функцию Ω , входящую в (8.14). Если это сделать, то вместо (8.23) для амплитуды подхвата получим формулу

$$\mathcal{T}_{\text{подхв}}(P_{3f}, K_{1i}) = \int \Omega_{e_{12}, P_{3f}}^{(-)*}(p_3) \Phi_{e_{23}}(p_3 - k_1) \Phi_{K_{1i}}(k_1) dp_3 dk_1. \quad (8.23')$$

Сравнение (8.14) и (8.23') наглядно демонстрирует тот факт, что амплитуды, даваемые этими формулами, соответствуют обращенным во времени процессам.

§ 9. Рассеяние нейтронов на химически связанном протоне

С физической ситуацией, описанной в конце предыдущего параграфа, физики встретились лет 30 назад, когда Э. Ферми начал изучать взаимодействие нейтронов с веществом. Тогда возник вопрос, чем отличаются сечения рассеяния нейтрона на свободном протоне и на

протоне, входящем в состав какой-нибудь молекулы. При этом, очевидно, заметные поправки к «свободному» сечению могут возникнуть только, когда энергия налетающих нейтронов E_n не очень велика — порядка энергий связи атомов в молекуле ($1 - 10 \text{ эв}$).

Впервые сечение рассеяния нейтронов на химически связанном протоне было рассчитано в 1936 г. (Э. Ферми, 1936) с помощью метода, получившего позднее название «метод псевдопотенциала». Им было получено приближенное выражение для амплитуды этого процесса («приближение Ферми»). Попытки улучшить приближение Ферми предпринимались неоднократно, но без особого успеха. Только в последние годы, уже после появления основополагающих работ по теории трех тел, удалось корректно оценить точность «приближения Ферми», которая, кстати говоря, оказалась совсем не такой высокой, как считалось раньше.

Чтобы оценить характер «приближения Ферми», воспользуемся точными формулами предыдущего параграфа, описывающими процесс рассеяния частицы 1 (нейтрон) на частице 2 (протон), связанной в поле бесконечно тяжелой частицы 3 (остов молекулы). Радиус нейтрон-протонного взаимодействия $r_0 \approx 2 \cdot 10^{-13} \text{ см}$, что на четыре порядка меньше характерных молекулярных размеров, и это полностью оправдывает сделанное в § 8 предположение о точечном характере взаимодействия между частицами 1 и 2.

Реальные нейтрон и протон обладают спином и взаимодействие между ними зависит от величины их полного спина $S = 0, 1$. Приведенные ниже конечные формулы (9.7), (9.8) годятся для каждого из этих двух случаев. Только под α надо понимать либо синглетную, либо триплетную амплитуду рассеяния. Для определенности во всех рассуждениях ниже будем предполагать, что существует связанное состояние наших двух частиц (это соответствует случаю $S = 1$).

Точная амплитуда рассеяния дается формулой (8.21)

$$F(K_f, K_i) = -N^2 \int \frac{\Phi_{p, f}^*(p_3 - k_1) \Phi_{n, K_f}^{(-)*}(k_1) \chi(p_3) \Phi(p_3)}{\frac{p_3^2}{2n_3} - (E + \varepsilon_d + i\gamma)} dp_3 dk_1, \quad (9.1)$$

в которой индексами p и n обозначены протонные и нейтронные в.ф., а все остальные обозначения те же, что и в § 8. Входящие в эту формулу величины χ и Φ определены формулами (8.6) и (8.19), (8.20). Приближением Ферми для амплитуда этого же процесса называется следующая формула:

$$F_{\text{Ферми}}(K_f, K_i) = \frac{\alpha}{4\pi^2 m_{12} h} \int \Phi_{p, f}^*(p_3 - K_f) \Phi_{p, i}(p_3 - K_i) dp_3, \quad (9.2)$$

где α — это амплитуда рассеяния нейтрона на свободном протоне, $\Phi_{p, f}$ и $\Phi_{p, i}$ — в.ф. конечного и начального состояний протона в молекуле, а K_f и K_i — конечный и начальный импульсы нейтрона.

Чтобы получить «приближение Ферми» из точной формулы (9.1), надо сделать следующие приближения:

1) при решении уравнения (8.19) для функции Φ надо ограничиться нулевым приближением

$$\Phi(p_3) \approx \Phi_0(p_3) = \int \Phi_{p, i}(p_3 - k_1) \Phi_{n, K_i}^-(k_1) dk_1. \quad (9.3)$$

2) пренебречь взаимодействием \hat{V}_{13} между нейтроном и остовом молекулы (частица 3). При этом

$$\Phi_{n, K_i}^-(k) = \delta(k - K_i), \quad \Phi_{n, K_f}^-(k) = \delta(k - K_f). \quad (9.4)$$

3) пренебречь всеми величинами размерности энергии в (9.1) по сравнению с энергией связи дейтона

$$\chi(p_3) = \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon_d} \left(E - \frac{p_3^2}{2n_3} \right)} \approx \frac{1}{2}, \quad (9.5)$$

$$\frac{p_3^2}{2n_3} - (E + \varepsilon_d + i\gamma) \approx -\varepsilon_d. \quad (9.6)$$

Подставляя (9.3) — (9.6) в (9.1) и используя (8.2), (8.3), немедленно получаем формулу «приближения Ферми» (9.2). Сечение рассеяния можно получить с помощью формул § 4. Подставляя (9.2) в (4.6), получаем сечение рассеяния нейтрона на химически связанном протоне:

$$d\sigma(q) = \left(\frac{m_1}{m_{12}} \right)^2 \alpha^2 \left| \int \Phi_{p, f}^*(p_3 - q) \Phi_{p, i}(p_3) dp_3 \right|^2 2\pi \sin \theta d\theta. \quad (9.7)$$

Здесь q — переданный нейтрону импульс: $q \equiv K_f - K_i$, а θ — угол рассеяния. Если $q = 0$, что возможно, либо когда энергия нейтрона очень мала и $K_f \approx K_i \approx 0$, либо когда рассматривается упругое рассеяние вперед, формула (9.7) сильно упрощается из-за ортонормированности протонных в.ф. Интеграл от произведения волновых функций в этом случае равен символу Кронекера δ_{ij} , т. е. возможно только упругое рассеяние; его сечение равно

$$d\sigma(q=0) = \left(\frac{m_1}{m_{12}} \right)^2 \alpha^2 \cdot 2\pi \sin \theta d\theta = 4\alpha^2 \cdot 2\pi \sin \theta d\theta. \quad (9.8)$$

Это сечение в четыре раза больше, чем сечение рассеяния нейтрона на свободном протоне. Физическая причина этого явления заключается в том, что при рассеянии нейтрона на протоне, связанном в молекуле, отдачу воспринимает не один протон, а вся молекула, масса которой бесконечна: $m_3 + m_2 = \infty$. С другой стороны, сечение рассеяния двух частиц друг на друге обратно пропорционально квадрату их приведенной массы:

$$\sigma \sim \lambda^2 = \left(\frac{h}{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} v} \right)^2.$$

Поэтому, если при всех прочих равных условиях менять массу частицы 2 от $n_2 = m_1$ до $m_2 = \infty$, то сечение возрастает в четыре раза. Именно это и произошло в рассматриваемом нами случае.

В заключение этого параграфа рассмотрим кратко характер упрощений (9.3) — (9.6), содержащихся в приближении Ферми. Анализ показывает, что наиболее обоснованными являются упрощения (9.6), (9.5). Так как молекулярные энергии и энергии медленных нейтронов

имеют порядок величины $E \sim \frac{p_3^2}{2n_3} \sim \varepsilon_0 = 1 \text{ эв}$, а энергия связи дейтона $\varepsilon_d = 2,2 \text{ Мэв}$, то относительная точность (9.6) и (9.5) составляет 10^{-6} и 10^{-3} соответственно. Относительная ошибка, связанная с упрощением (9.4), также имеет примерно такой же порядок величины, так как физически это упрощение соответствует пренебрежению эффектами перерассеяния внутри молекулы

(нейтрон сначала рассеивается на частице 3, а уж затем на протоне), порядок величины которых $\frac{\bar{a}}{R} = \frac{10^{-12} \text{ см}}{10^{-8} \text{ см}} \sim 10^{-4}$.

Здесь $\bar{a} \approx 10^{-12} \text{ см}$ — это порядок величины амплитуды рассеяния нейтрона на остове молекулы (частица 3), а $R = 10^{-8} \text{ см}$ — расстояние между ядрами атомов в молекуле.

Наибольшую ошибку вносит приближение (9.3). Как оказывается, отбрасывание второго члена в уравнении (8.19) для функции Φ , приведшее к (9.3), законно далеко не всегда. Хотя ядро интегрального уравнения (8.19) и содержит малый параметр $\alpha/R \approx 10^{-4}$, который легко усмотреть при обезразмеривании входящих в (8.19) величин, при определенных значениях энергии E второй член в (8.19) перестает быть малым. Это происходит, когда энергия рассеиваемого нейтрона близка к порогу возбуждения молекулы, при котором протон переходит на один из расположенных выше уровней. Физическая картина того, что при этом происходит, подробно разобрана в главе о пороговых явлениях. С точки же зрения формализма происходит следующее: входящая в выражение для эффективного потенциала U_E функция ΔG_3 , рассматриваемая как функции энергии, имеет полюса в точках расположения дискретных уровней протона в поле частицы 3. Наличие этих полюсов приводит к резкой зависимости U_E от энергии. В частности, когда энергия нейтрона близка к порогу возбуждения одного из протонных уровней, потенциал U_E неограниченно возрастает; в результате второй член в уравнении (8.19) может оказаться сравнимым с первым. При этих условиях, которые не так уж редко встречаются, «приближение Ферми» становится очень грубым, и относительная ошибка может достигать десятков процентов. Строгий расчет сечений в этом случае еще никем не производился.

ГЛАВА XI

МОДЕЛЬ ЛИ

§ 1. Введение. Импульсное представление

Обычно область нерелятивистской квантовой механики (в рамках которой находится материал данной книги) ограничивают процессами движения частиц в том или ином поле. Процессы рождения и превращения частиц относят к релятивистской теории или, как ее иначе называют, теории квантованных полей.

Такое разделение имеет глубокие основания, так как при рождении новой частицы нет причины, чтобы ее энергия была специально близка к ее массе покоя. В общем случае, следовательно, рождаются частицы с $E - mc^2 \sim mc^2$, т. е. с релятивистскими скоростями.

Рассмотрение рождения пар частица — античастица целиком связано с релятивистской формой теории. Поэтому нерелятивистская теория рождения и превращения частиц не может претендовать на прямые физические приложения (мы не касаемся здесь проблемы многих тел, где возникает понятие квазичастиц, описывающих коллективные возбуждения). Однако нерелятивистская теория может иметь педагогическое значение.

Релятивистская теория сразу обрушивает на обучающегося целый ряд новых понятий: меняется определение плотности вероятности, возникает понятие античастиц, необходимо рассматривать лоренц-инвариантность теории, существенную роль играет световой конус, доведение теории до наблюдаемых результатов требует перенормировки массы и заряда, возникает проблема «московского нуля» заряда.

В нерелятивистской теории рождения частиц, относящейся к идеализированной модели, можно в спокойной

обстановке изучить физический смысл одной части этих новых трудных понятий. Опыт показывает полезность такого методического приема, если не для всех, то во всяком случае для огромного большинства физиков; вместе с тем из этого правила есть и исключения: Л. Д. Ландау был физиком-теоретиком, который не нуждался в моделях и отрицательно относился к ним.

Конкретная модель такого рода была подробно рассмотрена в работе Т. Ли (1954) *) и вызвала большой интерес. Ниже будет рассмотрена модель Ли с некоторыми видоизменениями. Ли рассматривает совокупность трех типов частиц; два типа — тяжелые V и N , третий тип — легкая частица θ . Для такой частицы Ли пользуется релятивистским уравнением $E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$. При этом, однако, античастицы $\bar{\theta}$ не рассматриваются, и для всей работы это весьма существенно: именно благодаря отсутствию античастиц можно ограничиться малым числом типов состояний N : или $V \rightleftharpoons N + \theta$ или $\theta + V \rightleftharpoons N + 2\theta$. Если бы мы учли античастицы, то пришлось бы рассматривать неограниченную последовательность состояний

$$N \rightleftharpoons V + \bar{\theta} \rightleftharpoons N + \theta + \bar{\theta} \rightleftharpoons V + \theta + 2\bar{\theta} \rightleftharpoons \dots$$

Игнорирование $\bar{\theta}$ и делает теорию такой, что вычисления могут быть проведены до конца.

Но если античастицы $\bar{\theta}$ не рассматриваются, то релятивистское приближение для θ становится иллюзорным, непоследовательным.

Исходя из этого, ниже рассматривается теория, в которой θ также является нерелятивистской:

$$E_0(\mathbf{k}) = \mu + \frac{k^2}{2\mu} **).$$

*) Заметим, что способ расчета, аналогичный способу расчета в модели Ли, использовался ранее П. Дираком (1930) при рассмотрении резонансного рассеяния.

Видоизмененная модель Ли рассматривалась в работах Е. Кейзеса (1959, 1960); П. Сриваставы (1963). Релятивистская разрешимая модель изучалась в работах Ф. Захариазена (1961) и В. Тирринга (1962 А, В).

***) В этой главе мы далее всюду используем систему единиц, в которой $\hbar = c = 1$.

Такая теория может иметь непосредственный физический смысл, если разность масс N - и V -частиц близка к массе частицы θ :

$$|m_V - m_N - \mu| \ll \mu.$$

При этом, наряду с обычным в теории поля импульсным представлением, оказывается возможным записать все результаты и в координатном представлении.

Для волновой функции θ -частицы удается написать у. Ш. Возможность рождения θ описывается неоднородностью в у. Ш., т. е. членом, не содержащим ψ_θ . Благодаря этому достигается наглядность теории. Особенно полезна наглядная трактовка перенормировки массы и заряда.

Модель Ли обобщена также на случай частиц N и V со спином. При этом наглядно показано (Я. Б. Зельдович, 1957А), как теория с несохранением пространственной четности приводит к связи между спином нестабильной частицы и направлением вылета частицы при распаде.

Наряду с педагогическим значением рассмотрение моделей оказалось полезным и эвристически, для предсказания качественно новых эффектов, относящихся к взаимодействию с электромагнитным полем в теории, в которой пространственная четность не сохраняется. Сюда относится дипольный момент нестабильной частицы (Я. Б. Зельдович, 1960Б; А. М. Переломов, 1962) и анапольный момент (взаимодействие с током стабильной частицы) (Я. Б. Зельдович, 1957Б; Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, 1960).

Рассмотрим систему, состоящую из тяжелых частиц N и V и легких частиц θ . Гамильтониан системы без взаимодействия состоит из трех гамильтонианов свободного движения каждой из частиц:

$$H_0 = \int \left[m_0 V^+(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m_0} \nabla V^+ \nabla V \right] d\mathbf{r} + \\ + \int \left[m_N N^+(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m_N} \nabla N^+ \nabla N \right] d\mathbf{r} + \\ + \int \left[\mu \varphi^+(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2\mu} \nabla \varphi^+ \nabla \varphi \right] d\mathbf{r}. \quad (1.1)$$

Здесь m_0 , m_N и μ , V^+ , N^+ и φ^+ , V , N и φ — массы покоя и операторы рождения и уничтожения частиц V , N и θ соответственно. Свойства этих операторов подробно описаны, например, в «Квантовой механике» Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963).

Перейдем теперь, сделав преобразование Фурье, к импульсному представлению. Через новые операторы, зависящие от импульса, гамильтониан запишется в виде

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} [E_V(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}}^+ V_{\mathbf{k}} + E_N(\mathbf{k}) N_{\mathbf{k}}^+ N_{\mathbf{k}} + E_{\theta}(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{k}}^+ \varphi_{\mathbf{k}}]. \quad (1.2)$$

Но, как известно, вместо суммы по \mathbf{k} можно писать интеграл по \mathbf{k} :

$$H_0 = \int d\mathbf{k} [E_V(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}}^+ V_{\mathbf{k}} + E_N(\mathbf{k}) N_{\mathbf{k}}^+ N_{\mathbf{k}} + E_{\theta}(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{k}}^+ \varphi_{\mathbf{k}}]. \quad (1.2')$$

Здесь

$$E(\mathbf{k}) = m + \frac{k^2}{2m}. \quad (1.3)$$

Ясно, что при данном импульсе \mathbf{k} кинетической энергией тяжелых частиц можно пренебречь по сравнению с кинетической энергией θ -частицы. Поэтому в дальнейшем мы будем пользоваться гамильтонианом

$$\begin{aligned} H_0 &= \int [m_0 V^+(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) + m_N N^+(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}) + \\ &\quad + \mu \varphi^+(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2\mu} \nabla \varphi^+ \nabla \varphi] d\mathbf{r} = \\ &= \int d\mathbf{k} [m_0 V_{\mathbf{k}}^+ V_{\mathbf{k}} + m_N N_{\mathbf{k}}^+ N_{\mathbf{k}} + (\mu + \frac{k^2}{2\mu}) \varphi_{\mathbf{k}}^+ \varphi_{\mathbf{k}}] \quad (1.4) \end{aligned}$$

и иногда опускать индекс \mathbf{k} у операторов $N_{\mathbf{k}}$, $V_{\mathbf{k}}$ и $\varphi_{\mathbf{k}}$ для простоты письма. Итак, для θ -частицы зависимость энергии от импульса взята нерелятивистской, в отличие от оригинальной работы Ли, хотя и приплюсована масса покоя.

Собственные векторы H_0 можно классифицировать по числу частиц того или иного сорта. Вакуумный вектор $|0\rangle$ является собственным для этого гамильтониана,

и соответствующее значение энергии $E = 0$. Собственными векторами являются также векторы $V_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$, $N_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$ и $\varphi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$ с энергиями $E = m_0$, $E = m_N$ и $E = \mu + \frac{k^2}{2\mu}$ соответственно *).

Заметим, что эти векторы нормированы на $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$:

$$\langle 0 | \varphi_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}'}^+ | 0 \rangle = \langle 0 | [\varphi_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}'}^+] | 0 \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle 0 | 0 \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$$

Проверить равенства типа $H_0 \varphi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle = E_{\theta}(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$ легко, используя правила коммутации операторов. Заметим, что так как энергия V и N не зависит от импульса, собственными состояниями для H_0 будут являться векторы $\int f_1(\mathbf{r}) V^+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} |0\rangle$, $\int f_2(\mathbf{r}) N^+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} |0\rangle$ с произвольными функциями $f_1(\mathbf{r})$ и $f_2(\mathbf{r})$. Нам еще понадобятся состояния, в которых одновременно имеются две частицы — N и θ . Соответствующие векторы $N_{\mathbf{k}_1}^+ \varphi_{\mathbf{k}_2}^+ |0\rangle$ нормированы на δ -функцию и

$$E = m_N + \mu + \frac{k_2^2}{2\mu}.$$

Включение взаимодействия. Введем в гамильтониан взаимодействие, соответствующее реакции $V \rightleftharpoons N + \theta$. Эта реакция описывается в гамильтониане членом типа $V^+ N \varphi + V N^+ \varphi^+$. Для простоты будем считать, что все эти операторы берутся в одной и той же точке, т. е.

$$H_1 = g \int [V^+(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) N^+(\mathbf{r}) \varphi^+(\mathbf{r})] d\mathbf{r}. \quad (1.5)$$

Хотя в нерелятивистской теории возможно введение и нелокального взаимодействия, «дальнодействия», однако при переходе к релятивизму нелокальность в пространстве неизбежно приведет к нелокальности во времени и вступит в противоречие с представлениями о причинности. Поэтому мы и рассматриваем локальное

*) Массу «голой» частицы V , как собственное значение гамильтониана без взаимодействия H_0 , мы обозначаем m_0 . Обозначение m_V мы введем несколько позднее; оно относится к «физической» частице V .

взаимодействие. В импульсном представлении H_1 имеет такой вид:

$$H_1 = g\Omega^{-1/2} \sum_{k_1, k_2, k_3} (V_{k_1}^+ N_{k_2} \Phi_{k_3} + V_{k_1} N_{k_2}^+ \Phi_{k_3}^+) \delta_{k_1, k_2+k_3} \quad (1.6)$$

где Ω — объем, внутри которого находятся рассматриваемые частицы. Переходя от суммы по \mathbf{k} к интегралу по \mathbf{k} , получаем

$$H_1 = \frac{g}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3 (V_{k_1}^+ N_{k_2} \Phi_{k_3} + V_{k_1} N_{k_2}^+ \Phi_{k_3}^+) \times \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3). \quad (1.6')$$

Нетрудно видеть, что система, описываемая полным гамильтонианом

$$H = H_0 + H_1,$$

имеет два простых закона сохранения:

$$\left. \begin{aligned} n_V + n_N &= n_1 = \text{const}, \\ n_V + n_\theta &= n_2 = \text{const}, \end{aligned} \right\} \quad (1.7)$$

где n_V , n_N и n_θ — полные числа V -, N - и θ -частиц. Поэтому можно, да и естественно, в качестве собственных состояний системы выбирать состояния с определенным значением этих сохраняющихся чисел. Благодаря тому, что эти числа положительны (отсутствие античастиц), собственные функции содержат конечное число частиц, и задача может быть решена точно (без теории возмущений, например).

Легко видеть, что свободные N - и θ -частицы остаются собственными состояниями и при включении взаимодействия, причем энергия этих состояний остается той же, т. е.

$$\left. \begin{aligned} (H_0 + H_1) N_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle &= m_N N_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle, \\ (H_0 + H_1) \Phi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle &= \left(\mu + \frac{k^2}{2\mu}\right) \Phi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (1.8)$$

Однако «голая» V -частица $-V_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$ — не является собственным вектором полного гамильтониана. Задачу о состоянии физической V -частицы $|V_{\text{физ},0}\rangle \equiv |V_0\rangle$ решим сначала в первом порядке теории возмущений. Матрич-

ные элементы взаимодействия H_1 для переходов из состояния $V_0^+ |0\rangle$ отличны от нуля только для состояний $N_{-\mathbf{k}}^+ \Phi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$. Поэтому мы должны написать:

$$|V_{\text{физ},0}\rangle = |V_0\rangle = V_0^+ |0\rangle + \int d\mathbf{k} f(\mathbf{k}) N_{-\mathbf{k}}^+ \Phi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle, \quad (1.9)$$

где $f(\mathbf{k})$ — величина первого порядка по g . Коэффициент при $V_0^+ |0\rangle$ здесь принят равным единице, поскольку мы используем первый порядок теории возмущений.

Мы имеем уравнение

$$(H_0 + H_1) |V_0\rangle = m_V |V_0\rangle. \quad (1.10)$$

Очень существенно, что уже при рассмотрении первого порядка теории возмущений мы берем точное значение энергии состояния m_V , смещенное относительно m_0 . Дело в том, что хотя поправка первого порядка к энергии равна нулю, уже во втором порядке теории возмущений $m_0 - m_V$ становится бесконечным.

Приравнявая члены при $N_{-\mathbf{k}}^+ \Phi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$, получим

$$f(\mathbf{k}) = - \frac{g(2\pi)^{-3/2}}{E_N(\mathbf{k}) + E_\theta(\mathbf{k}) - m_V} = - \frac{g(2\pi)^{-3/2}}{m_N + \mu + \frac{k^2}{2\mu} - m_V}. \quad (1.11)$$

Таким образом, вероятность найти физическую V -частицу в виде N и θ с импульсами от k до $k + dk$ в первом порядке теории возмущений дается выражением

$$\frac{g^2}{[E(\mathbf{k}) - m_V]^2} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (1.12)$$

Точное решение почти не отличается от первого порядка теории возмущений. Так как собственные состояния H образуют полную систему, то естественно искать собственный вектор H в виде суперпозиции собственных векторов H_0 . Каждый член этой суммы должен принадлежать тому же значению «зарядов» n_1 и n_2 , что и $V^+ |0\rangle$: $n_1 = 1$, $n_2 = 1$. Такими векторами являются, кроме $V^+ |0\rangle$, лишь двухчастичные состояния $N_{k_1}^+ \Phi_{k_2}^+ |0\rangle$.

Поэтому решение будем искать в виде

$$|V_0\rangle = Z^{\frac{1}{2}} \left[V_0^+ |0\rangle + \int dk_1 dk_2 f(k_1, k_2) N_{k_1 \Phi_{k_2}}^+ |0\rangle \right]. \quad (1.13)$$

Вполне нагляден смысл этой записи: состояние физической V -частицы ищем в виде «голой» V -частицы, окруженной облаком продуктов ее распада (быть может, виртуального). Константа Z введена для нормировки вектора; для простоты мы рассматриваем покоящуюся V -частицу. Теперь следует потребовать, чтобы $|V_0\rangle$ было собственным вектором $H_0 + H_1$ с собственным значением m_V — наблюдаемой массой V -частицы. Очевидно, автоматически будет выполнен закон сохранения импульса:

$$f(k_1, k_2) = f(k_2) \delta(k_1 + k_2).$$

Поэтому уравнение сведется к следующему:

$$\begin{aligned} (H_0 + H_1) \left[V_0^+ + \int dk f(k) N_{-k \Phi_k}^+ \right] |0\rangle = \\ = m_V \left[V_0^+ + \int dk f(k) N_{-k \Phi_k}^+ \right] |0\rangle. \end{aligned}$$

Приравнявая коэффициенты при $N_{-k \Phi_k}^+ |0\rangle$, получим для $f(k)$ старое выражение (1.11).

Предположим, что $\kappa^2 = 2\mu(m_N + \mu - m_V) > 0$. Это обеспечит стабильность V -частицы*). Далее, приравняв члены с $V_0^+ |0\rangle$, имеем

$$\begin{aligned} m_0 = m_V - g(2\pi)^{-3/2} \int dk f(k) = \\ = m_V + g^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{E(k) - m_V} = m_V + \frac{\mu g^2}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\kappa^2 + k^2}. \quad (1.14) \end{aligned}$$

Полученное уравнение можно рассматривать как способ определить наблюдаемую массу m_V через m_0 и g . Однако m_V входит в это уравнение достаточно сложным образом: и в виде слагаемого, и в κ^2 . Удобнее поэтому

*) Для нестабильной V -частицы $m_V = \text{Re } m_V + i \text{Im } m_V$; правило обхода полюса при интегрировании по k должно выделять только расходящиеся волны (см. гл. VII).

определять m_0 через g и наблюдаемое экспериментально значение массы m_V . Если взаимодействие строго локально, т. е. имеет вид (1.5), то интеграл в (1.14) расходится. Заметим, что при релятивистской зависимости $E(k)$ он также расходится. Следовательно, затравочная масса m_0 должна быть взята бесконечной положительной для того, чтобы получить конечную наблюдаемую массу m_V . Это и есть перенормировка массы V -частицы. Вычислим теперь нормировочную постоянную Z , требуя, чтобы $\langle V_{\text{физ}} | V_{\text{физ}} \rangle = 1$. Мы получим

$$Z^{-1} = 1 + \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{[E(k) - m_V]^2}. \quad (1.15)$$

При нерелятивистской $E(k)$ в теории со скалярным локальным взаимодействием этот интеграл сходится. Однако если взять векторное взаимодействие (см. ниже), то этот интеграл также будет расходящимся. При релятивистской же $E(k)$ этот интеграл расходится и для скалярного взаимодействия.

Заметим одно важное равенство:

$$Z^{-1} = \frac{dm_0}{dm_V}. \quad (1.16)$$

Оно сохраняется и в релятивистском случае, когда обе величины, Z^{-1} и m_0 , выражаются расходящимися интегралами.

Для того чтобы понять физический смысл этого равенства, подействуем на систему, находящуюся в состоянии $|V_0\rangle$, малым возмущением вида $\Delta H = \Delta m_0 V_0^+ V_0$. Масса физической частицы V при этом изменяется: $\Delta m = B \Delta m_0$, причем коэффициент B есть доля «голой» частицы V в физической V -частице, т. е. $B = Z$. Заметим, что такой способ определения доли «голой» частицы V в физической V -частице аналогичен рассмотренному в гл. VII способу определения времени столкновения частицы с помощью магнитного поля.

Итак, вероятность найти физическую V -частицу в виде θ и N в точном решении равна

$$\frac{g^2 Z}{[E(k) - m_V]^2} \frac{dk}{(2\pi)^3},$$

т. е. по сравнению с теорией возмущений g^2 заменяется величиной g_r^2 :

$$g_r^2 = Zg^2 = g^2 \left\{ 1 + \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{[E(k) - m_V]^2} \right\}^{-1} = g^2 (1 + g^2 I)^{-1}. \quad (1.17)$$

Так как эта вероятность является наблюдаемой величиной, то наблюдаемой величиной должен быть именно перенормированный заряд g_r^2 . Очень важно, что именно g_r^2 войдет в формулы для сечения рассеяния, которое, несомненно, является наблюдаемым.

Рассеяние в скалярном взаимодействии. Введение взаимодействия в гамильтониан приводит к тому, что состояние, в котором имеются одновременно N - и θ -частицы с определенными импульсами, перестает быть собственным. Попросту говоря, это означает, что появляется рассеяние. Рассмотрим стационарную задачу о рассеянии θ -частицы на N^*). Естественно работать в системе центра масс (что, впрочем, для нас несущественно, так как N и V гораздо тяжелее, чем θ). Как и обычно, в решение включаем падающую волну $N_{-k_0}^+ \Phi_{k_0}^+ |0\rangle$, рассеянную волну и виртуально образующуюся V -частицу («голую», а не физическую):

$$\Phi = N_{-k_0}^+ \Phi_{k_0}^+ |0\rangle + \int dk \chi(k) \Phi_k^+ N_{-k}^+ |0\rangle + CV_0^+ |0\rangle \quad (1.18)$$

и требуем, чтобы

$$(H_0 + H_1) \Phi = E(k_0) \Phi, \quad (1.19)$$

где

$$E(k) = m_N + \mu + \frac{k^2}{2\mu}.$$

*) Более сложной является задача рассеяния θ на V -частице, поставленная Г. Челленом и В. Паули (1955). Амплитуда $\theta - V$ -рассеяния впервые была определена в работе Р. Амадо (1961), а в ряде последующих работ (Р. Кеншафт, Р. Амадо, 1964; А. Пагнамента, 1965; Ч. Саммерфильд, 1965; Э. Кейзес, 1965; Т. Мута, 1965) были найдены и волновые функции частицы.

Из (1.19) получаем систему

$$\left. \begin{aligned} \chi(k) [E(k) - E(k_0)] + g(2\pi)^{-3/2} C = 0, \quad |k| \neq |k_0|, \\ C [m_0 - E(k_0)] + g(2\pi)^{-3/2} \left[1 + \int dk \chi(k) \right] = 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.20)$$

Функция $\chi(k)$ имеет полюс при $|k| = |k_0|$, $\chi(k) \approx \frac{B}{k^2 - k_0^2 - i\epsilon}$. Ее вычет в этом полюсе, как нетрудно видеть, определяет амплитуду рассеяния $A = 2\pi^2 B$, а тем самым и сечение рассеяния. Для C получаем

$$C \left[E(k_0) - m_0 + \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{E(k) - E(k_0) - i\epsilon} \right] = \frac{g}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (1.21)$$

Интеграл в этом выражении расходится, и, на первый взгляд, вследствие этого мы должны предположить, что $C = 0$, $\chi = 0$ и рассеяние θ на N в нашей модели отсутствует. Заметим, однако, что у нас получилась разность расходящегося интеграла и бесконечной величины m_0 . Производя перенормировку массы, выразив величину m_0 через наблюдаемую массу m_V и интеграл (тоже расходящийся) по формуле (1.14), мы получим, сложив два интеграла, конечное, сходящееся выражение

$$\begin{aligned} & -m_0 + \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{E(k) - E(k_0) - i\epsilon} = \\ & = -m_V - \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{E(k) - m_V} + \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{E(k) - E(k_0) - i\epsilon} = \\ & = -m_V + \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{(E(k_0) - m_V) dk}{(E(k) - E(k_0) - i\epsilon)(E(k) - m_V)}. \\ & C \left[E(k_0) - m_V + \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int \frac{(E(k_0) - m_V) dk}{[E(k) - E(k_0) - i\epsilon][E(k) - m_V]} \right] = \\ & = \frac{g}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (1.22) \end{aligned}$$

Точнее говоря, мы улучшили сходимости интеграла, добавив в знаменатель лишнюю степень $E(k) \sim k^2$ за счет исключения из первоначального интеграла величины m_0 . В частности, в нашей модели этот интеграл уже

сходится, и мы говорим, что для исключения расходимостей достаточно сделать перенормировку массы. Это, однако, не имеет места при релятивистской зависимости $E(k)$. Поэтому, имея в виду показать способы исключения расходимости, мы сделаем дальнейшие преобразования, чтобы ответ выразить через перенормированную величину g_r^2 . Обозначим

$$I_2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{[E(k) - E(k_0) - i\varepsilon][E(k) - m_V]}. \quad (1.23)$$

Для рассеянной волны мы имеем

$$\chi(k) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{[E(k) - E(k_0)][E(k_0) - m_V]} \frac{g^2}{1 + g^2 I_2}. \quad (1.24)$$

Выражая g^2 через g_r^2 , получим

$$\chi(k) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{[E(k) - E(k_0)][E(k_0) - m_V]} \frac{g_r^2}{1 + g_r^2 (I_2 - I_1)},$$

где

$$I_2 - I_1 = \frac{E(k_0) - m_V}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{[E(k) - E(k_0) - i\varepsilon][E(k) - m_V]}. \quad (1.25)$$

Теперь постараемся уяснить логическую сторону перенормировки, встав на ту точку зрения, что в действительности взаимодействие не строго локально, а размазано до малых расстояний $\sim \rho$, и вследствие этого при весьма больших значениях импульса $\Lambda \sim \frac{1}{\rho}$ происходит обрезание. Это значит, что интегралы по dk мы берем не до бесконечности, а до Λ .

При фиксированном значении Λ все получаемые выражения будут конечны. Однако это отнюдь не значит, что ими удобно пользоваться и, тем более, переходить к пределу $\rho \rightarrow 0$ ($\Lambda \rightarrow \infty$). Возможность предельного перехода и удобство пользования возникают лишь в том случае, если считать известными (и заданными, не зависящими от Λ) перенормированные величины m_V и g_r и выражать результаты именно через m_V и g_r . Чтобы наглядно продемонстрировать это, составим сводку фор-

мул, в которых будем считать заданными: 1) m_0, g, Λ ; 2) m_V, g, Λ ; 3) m_V, g_r, Λ ; $\Lambda \rightarrow \infty$.

$$1) A = -\frac{\mu}{2\pi} \frac{g^2}{E(k_0) - m_0 + \frac{\mu g^2}{\pi^2} \left(\Lambda + \frac{\pi i}{2} k_0 - \frac{k_0^2}{\Lambda} \right)}, \quad (1.26)$$

$$m_0 = m_V + \frac{\mu g^2}{\pi^2} \left(\Lambda - \frac{\pi}{2} \kappa + \frac{\kappa^2}{\Lambda} \right),$$

$$g_r^2 = g^2 \left[1 + \frac{\mu g^2}{\pi^2} \left(\frac{\pi}{2} \frac{\mu}{\kappa} - \frac{2\mu}{\Lambda} \right) \right]^{-1};$$

$$2) A = -\frac{\mu g^2}{2\pi} \frac{1}{E(k_0) - m_V} \frac{1}{1 + \frac{2\mu^2 g^2}{\pi^2} \left(\frac{\pi}{2} \frac{1}{\kappa - ik_0} - \frac{1}{\Lambda} \right)}; \quad (1.26')$$

$$3) A = -\frac{\mu g_r^2}{2\pi} \frac{1}{E(k_0) - m_V} \frac{1}{1 + \frac{\mu^2 g_r^2}{2\pi\kappa} \frac{\kappa + ik_0}{\kappa - ik_0}}. \quad (1.26'')$$

Заметим, что при переходе 1) \rightarrow 2) \rightarrow 3) зависимость амплитуды рассеяния A от Λ при $\Lambda \rightarrow \infty$ становится все более слабой и в случаях 2), 3) эта величина имеет отличный от нуля предел при $\Lambda \rightarrow \infty$.

§ 2. Координатное представление

Очень наглядные результаты получаются при решении задачи о физической V -частице непосредственно в координатном представлении (В. Н. Грибов, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, 1961). В силу инвариантности гамильтониана относительно преобразований Галилея движение центра масс системы не может влиять на получаемые результаты. Поэтому, как и во всех задачах нерелятивистской квантовой механики для двух тел, мы можем выделить это движение, и в результате задача сведется к определению движения частицы с приведенной массой вокруг бесконечно тяжелого (неподвижного) центра. В нашем случае приведенная масса N и θ , равная $m_N \mu / (m_N + \mu)$, мало отличается от массы μ самой θ -частицы. Поэтому мы можем пренебречь различием

между этими величинами и всюду употреблять просто μ . В силу же того, что движение центра масс уже выделено, мы можем ввести операторы рождения V - и N -частиц в какой-либо точке (для определенности в начале координат) V^+ и N^+ такие, что $\langle 0|VV^+|0\rangle = 1$ и $\langle 0|NN^+|0\rangle = 1$. Чтобы получить конечные результаты, мы возьмем сначала гамильтониан H_1 , в котором функция взаимодействия размазана до расстояний $\sim \rho$ (имея в виду последующий переход к пределу при $\rho \rightarrow 0$)*). Такой способ действий как раз соответствует программе перенормировки. Для простоты расчетов функцию взаимодействия возьмем в виде $g(\mathbf{r}) = g \frac{\delta(|\mathbf{r}| - \rho)}{4\pi\rho^2}$ (так, что $\int g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = g$). Тогда

$$H = H_0 + H_1 = m_0 V^+ V + m_N N^+ N + \int \varphi^+(\mathbf{r}) \left(\mu - \frac{1}{2\mu} \Delta \right) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \left[g V^+ N \int \frac{\delta(|\mathbf{r}| - \rho)}{4\pi\rho^2} \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \text{э. с.} \right]. \quad (2.1)$$

Решение для физической V -частицы ищем в виде

$$|V_{\text{физ}}\rangle = Z^{1/2} [V^+|0\rangle + N^+ \int \psi(\mathbf{r}) \varphi^+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} |0\rangle]. \quad (2.2)$$

У. Ш. для этого случая дает

$$m_0 + g\psi(\rho) = m_V, \quad (2.3)$$

$$\Delta\psi - \kappa^2\psi = 2\mu g \frac{\delta(|\mathbf{r}| - \rho)}{4\pi\rho^2} \quad (2.4)$$

с $\kappa^2 = 2\mu(m_N + \mu - m_V)$. (Здесь мы сразу учли сферическую симметрию $\psi(\mathbf{r})$.) Если $\rho \ll 1/\kappa$ (что всегда можно считать выполненным, так как $\rho \rightarrow 0$), то уравнение (2.4) можно заменить**) на

$$\Delta\psi - \kappa^2\psi = 2\mu g \delta(\mathbf{r}), \quad (2.4')$$

*) Строго говоря, нижеследующий выбор $g(\mathbf{r})$ соответствует взаимодействию в тонком сферическом слое радиуса ρ .

**) Более строго решение уравнения (2.4) при $r \geq \rho$ отличается от (2.4') на величину второго порядка малости по ρ . Такими величинами мы пренебрегаем сразу.

и тогда

$$\psi(\mathbf{r}) = -2\mu g \frac{e^{-\kappa r}}{4\pi r}, \quad (2.5)$$

$$m_0 = m_V + \frac{\mu g^2}{2\pi} \frac{e^{-\kappa\rho}}{\rho}. \quad (2.6)$$

Разлагая (2.6) по степеням ρ , отбросим члены начиная с первого порядка по ρ :

$$m_0 = m_V + \frac{\mu g^2}{2\pi} \frac{1}{\rho} - \frac{\mu g^2}{2\pi} \kappa, \quad (2.6')$$

откуда видно, что $m_0 \sim 1/\rho$ при $\rho \rightarrow 0$. Легко убедиться в том, что волновая функция частицы θ в импульсном представлении ($f(\mathbf{k})$ в (1.11)) есть фурье-образ функции $\psi(\mathbf{r})$ в (2.5). Очевидно, поэтому и нормировочный множитель $Z = \left[1 + \int |\psi|^2 d\mathbf{r} \right]^{-1}$ здесь совпадает с Z , вычисленным в импульсном представлении.

Формула (2.6') определяет перенормировку массы. Можно ввести и перенормированный заряд $g_r^2 = Zg^2$. Если обозначить

$$\int |\psi|^2 d\mathbf{r} = \int d\mathbf{k} |f(\mathbf{k})|^2 = g^2 I_1, \quad I_1 = \frac{\mu^2}{2\pi\kappa}, \quad (2.7)$$

то мы будем иметь

$$Z^{-1} = 1 + g^2 I_1, \quad g^2 = \frac{g_r^2}{1 - g_r^2 I_1}. \quad (2.8)$$

Из последней формулы ясно, что наблюдаемое значение заряда подчиняется неравенству*)

$$g_r^2 \leq I_1^{-1} = \frac{2\pi\kappa}{\mu^2}. \quad (2.9)$$

В противном случае $g^2 < 0$, т. е. g становится мнимым. Мнимость g означает неэрмитовость гамильтониана и сильнейшим образом нарушает всю вероятностную

*) Это неравенство впервые было получено в работе М. Рудермана и С. Газировича (1958). Знак равенства соответствует случаю, рассмотренному Л. Д. Ландау (1960). Неравенство было обобщено также на релятивистский случай (Б. В. Гешкенбейн, Б. Л. Иоффе, 1963; Н. Н. Мейман, 1963; Н. Н. Мейман, А. А. Славнов, 1964).

интерпретацию квантовой механики. В частности, величина Z , равная вероятности найти физическую V -частицу в виде «голой» $V^+|0\rangle$, становится отрицательной. Перенормировка массы при $g^2 < 0$ приводит к тому, что $m_V > m_0$. Но по вариационному принципу взаимодействие типа превращений может лишь уменьшить энергию основного состояния. Следовательно, при $g^2 < 0$ появятся состояния V -частицы, отличные от физических, с $E < m_V$, так называемые «духи» (Г. Челлен, В. Паули, 1955). При рассеянии θ -частиц на физических V -частицах будут происходить переходы в «духовые» состояния, и притом с отрицательной вероятностью. Все это делает теорию при $g_r^2 > g_c^2 = 1/I_1$ неприемлемой по физическим соображениям.

Обратимся теперь к задаче рассеяния. Решение у. Ш. $H\Phi = E\Phi$ с $E = m_N + \mu + k^2/2\mu$ ищем в виде

$$\Phi = CV^+|0\rangle + N^+ \int \psi_z(\mathbf{r}) \varphi^+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} |0\rangle, \quad (2.10)$$

где

$$\psi_z(\mathbf{r}) = \frac{1}{2ikr} (-e^{-ikr} + S(k)e^{ikr}).$$

Для величин $S(k)$ и C получаем уравнения

$$\left(\frac{k^2}{2\mu} + \mu + m_N - m_0\right)C = \frac{g}{2ik} \frac{S-1}{\rho} + \frac{g}{2}(S+1), \quad (2.11)$$

$$C = -\frac{\pi}{i\mu kg}(S-1). \quad (2.12)$$

Подставляем в (2.11) значение C из (2.12) и значения m_0 из (2.6). При этом члены, содержащие $1/\rho$, сокращаются, что означает ренормируемость теории: при $\rho \rightarrow 0$ $m_0 \rightarrow \infty$, но результаты, относящиеся к рассеянию, стремятся к пределу, не зависящему от радиуса обрезания.

Одновременно из уравнений устраняется величина затравочной массы m_0 «голой» частицы V и в ответ входит величина κ , зависящая от массы физической V -частицы.

После элементарных алгебраических преобразований получаем

$$ik \frac{1+S}{1-S} = \kappa + \frac{\pi}{g^2\mu^2}(k^2 + \kappa^2). \quad (2.13)$$

Теперь нетрудно получить и выражение для амплитуды рассеяния

$$A = -\frac{\frac{\mu g^2}{2\pi}}{1 + \frac{\mu^2 g^2}{\pi} \frac{1}{\kappa - ik}} \frac{1}{E+Q}, \quad Q = m_N + \mu - m_V. \quad (2.14)$$

Заметим, что довольно часто физический (перенормированный) заряд определяют по полюсному члену в амплитуде рассеяния:

$$A \sim -\frac{\mu g_r^2}{2\pi(E+Q)} \text{ при } E \rightarrow -Q. \quad (2.15)$$

Поскольку вычет амплитуды рассеяния в полюсе $E = -Q$ равен

$$\text{Res } A = -\frac{\mu g^2}{2\pi \left(1 + \frac{\mu^2 g^2}{2\pi\kappa}\right)}, \quad (2.16)$$

то это определение перенормированного заряда совпадает с определением по формуле (1.17).

Из (2.16) находим, что вычет амплитуды рассеяния отрицателен и по модулю ограничен сверху:

$$|\text{Res } A|_{E=-Q} \leq \frac{\kappa}{\mu}, \quad \kappa = \sqrt{2\mu Q}. \quad (2.17)$$

Заметим, что это ограничение на величину вычета совпадает с ограничением, получающимся из формулы (3.9) гл. III при $R = 0$. Это не удивительно, поскольку формулу (2.17) можно получить, используя результат работы Л. Кастильехо, Р. Далица, Ф. Дайсона (1956), исходя лишь из свойств аналитичности и унитарности, которые выполняются как в случае потенциального рассеяния, так и в модели Ли.

Амплитуда рассеяния A как функция комплексного k имеет еще второй полюс при $k = -i\left(\kappa + \frac{\mu^2 g^2}{\pi}\right)$. Этот полюс, однако, находится на нефизическом листе комплексной плоскости E .

Перенормированный заряд g_r удовлетворяет неравенству (2.9), причем предельное значение достигается при неограниченном увеличении «голой» константы g .

При этом доля «голой» V -частицы в физической V -частице стремится к нулю, физическая V -частица в пределе целиком «состоит» из $N + \theta$ *). Таким образом, предельное значение вычета соответствует переходу к составной модели частицы V , состоящей из локально связанных N и θ .

Как видно из (2.14), в пределе при $g^2 \rightarrow \infty$ мы получаем результаты, в точности совпадающие с результатами теории потенциального рассеяния на сингулярном потенциале с данным положением дискретного уровня при $E = -Q$.

Мерой приближения к пределу является близость к единице доли $N + \theta$ в амплитуде физической V -частицы; при этом доля «голой» V -частицы стремится к нулю. По существу, «голая» частица V как таковая исчезает и играет только роль переносчика локального взаимодействия, связывающего N и θ в физической частице. Условие близости к пределу имеет вид $g^2 \gg \frac{2\pi\kappa}{\mu^2}$. Таким образом, чем ближе находится полюс, чем меньше κ , тем раньше, при меньшем значении g получаются предельные соотношения, характерные для составной модели.

§ 3. Взаимодействие с нестабильной промежуточной частицей **)

Перейдем теперь к решению уравнений для случая нестабильной промежуточной частицы. При этом мы следуем методу В. Н. Грибова, Я. Б. Зельдовича и А. М. Переломова (1961).

Предполагаем, что нестационарное у. Ш. имеет решение, экспоненциально зависящее от времени (т. е. $\sim e^{-iEt}$ с комплексным значением E_0), характеризующее тем, что пространственная часть решения, описываю-

*) На языке констант перенормировки это соответствует стремлению к нулю величины Z . Условие $Z = 0$ и в релятивистском случае можно считать условием того, что данная частица является составной.

***) Нестабильная частица в модели Ли рассматривалась в работах М. Леви (1959) и Я. Б. Зельдовича (1961).

щего частицы A и B , содержит одну только расходящуюся волну, т. е. $\psi \sim e^{ik_0 r}/r$. При этом k_0 также окажется комплексным. Для такого хотя и нестационарного, но экспоненциального решения также можно воспользоваться уравнениями типа (2.3) и (2.4).

Общий план решения такой же, как и в случае стабильной V : считаем известными свойства физического нестабильного состояния, т. е. E_0 и k_0 , $E_0 = \frac{k_0^2}{2\mu} + \mu + m_N$, и с помощью уравнений выражаем нефизическую величину затравочной массы m_0 через физическую E_0 , заряд g и радиус обрезания ρ .

Затем обращаемся к задаче рассеяния, т. е. к задаче с произвольным вещественным положительным k , со сходящейся и расходящейся волнами и находим амплитуду рассеяния. При этом пользуемся значением m_0 , выраженным через E_0 , g , ρ ; как и раньше, члены $1/\rho$ при этом сокращаются, т. е. расчет имеет определенный предел при $\rho \rightarrow 0$, $m_0 \rightarrow \infty$. До выкладки сделаем еще два замечания. Результат нельзя получить из предыдущего результата для стабильной частицы, формально заменяя κ на $-ik_0$, так как затравочная масса m_0 хотя и является нефизической величиной, содержит член $1/\rho$ ($m_0 \rightarrow \infty$ при $\rho \rightarrow 0$), но должна быть вещественной для того, чтобы гамильтониан был эрмитовым, чтобы была унитарность. Формальная замена κ на $-ik_0$ в (2.6') не обеспечит вещественности m_0 .

Второе замечание, чисто техническое, заключается в том, что в качестве исходной величины удобно взять $k_0 = v - i\omega$ и выразить ответ через v и ω , вещественные и положительные.

Итак, для нестабильного состояния

$$\psi(r) = C \frac{e^{iv r + \omega r}}{r}, \quad E_0 = \frac{v^2 - \omega^2}{2\mu} - i \frac{v\omega}{2\mu} + \mu + m_N. \quad (3.1)$$

При подстановке $\psi(r)$ в у. Ш. члены $E_0\psi$ и $(\mu + m_N - \frac{\Delta}{2\mu})\psi$ снова уничтожаются, и аналогично (2.5) мы получаем

$$\psi(r) = -\frac{\mu g}{2\pi} \frac{e^{iv r + \omega r}}{r}. \quad (3.2)$$

Подставляем (3.2) в (2.3):

$$m_0 = E_0 + \frac{\mu g^2}{2\pi} \left(\frac{1}{\rho} + \omega + i\nu \right) = \\ = \frac{v^2 - \omega^2}{2\mu} - i \frac{v\omega}{\mu} + \frac{\mu g^2}{2\pi} \left(\frac{1}{\rho} + \omega + i\nu \right). \quad (3.3)$$

В отличие от (2.6'), это уравнение комплексное. Так как m_0 вещественно, то из рассмотрения мнимой части (3.3) сразу получим

$$\omega = \frac{\mu^2 g^2}{2\pi}. \quad (3.4)$$

Задача со стабильной частицей V характеризовалась двумя параметрами: Q (или κ) и g . Задача с нестабильной частицей на первый взгляд характеризуется тремя величинами v , ω и g , но связь (3.4) оставляет два параметра. Для сокращения записи дальше везде выражаем g^2 через ω .

В частности,

$$m_0 = \frac{v^2 + \omega^2}{2\mu} + \frac{\omega}{\mu} \frac{1}{\rho}. \quad (3.5)$$

Обратимся к задаче рассеяния. Уравнения (2.10) — (2.12) остаются справедливыми, разница заключается лишь в использовании (3.5) для m_0 , а также в том, что в ответе g^2 выражаем через ω согласно (3.4). После элементарных алгебраических преобразований получаем

$$ik \frac{1+S}{1-S} = \frac{k^2 - v^2 - \omega^2}{2\omega}, \quad (3.6)$$

$$S = \frac{(k-v-i\omega)(k+v-i\omega)}{(k-v+i\omega)(k+v+i\omega)}. \quad (3.7)$$

Функция S (а следовательно, и амплитуда рассеяния) имеет два полюса в k -плоскости ниже вещественной оси при $k = \pm v - i\omega$. В верхней полуплоскости k , т. е. на первом листе E , полюсов нет.

Очевидно, что для $\psi(r)$ вида (3.1)

$$\frac{d \ln(r\psi)}{dr} = ik \frac{S+1}{S-1}. \quad (3.8)$$

Следовательно, выражение (3.8), относящееся к стабильной частице, в пределе при $g^2 \rightarrow \infty$ дает

$$\frac{d \ln(r\psi)}{dr} = -\kappa, \quad (3.9)$$

в соответствии с классической теорией Г. Бете — Р. Пайерлса (1935). В случае нестабильной V -частицы (3.6) дает

$$\frac{d \ln(r\psi)}{dr} = \frac{v^2}{2\omega} + \frac{\omega}{2} - \frac{k^2}{2\omega}, \quad (3.10)$$

что при вещественных v и ω и положительном ω никак нельзя преобразовать к виду

$$\frac{d \ln(r\psi)}{dr} = \kappa_1, \quad \kappa_1 > 0, \quad (3.11)$$

который соответствовал бы рассеянию на сингулярном потенциале с виртуальным уровнем (типа синглетного взаимодействия нейтрона с протоном). Иными словами, дело в том, что расчет с нестабильной частицей дает в k -плоскости два полюса, расположенных симметрично относительно мнимой оси ниже вещественной оси.

Сингулярный потенциал с виртуальным уровнем соответствует одному полюсу на мнимой оси ниже вещественной оси при $k = -i\kappa_1$ (см. (3.11)).

Если даже сделать так, чтобы два полюса от нестабильной частицы слились и попали в ту же точку $k = -i\kappa_1$, то в этой точке получится полюс второго порядка и формулы все равно не совпадут со случаем сингулярного потенциала, где полюс первого порядка.

В случае стабильной частицы оба полюса лежат на мнимой оси и не совпадают, поэтому можно сделать так, чтобы один полюс уходил на бесконечность, в то время как второй был фиксирован; в случае нестабильной частицы этого нельзя сделать из-за условия симметрии полюсов относительно мнимой оси.

Как видно из (3.4), в пределе при $g^2 \rightarrow \infty$ $\omega \rightarrow \infty$; подставляя в (3.7), получим $S = 1$ при любых конечных κ и v . Таким образом, теория с нестабильной частицей

не имеет никакого разумного предела при сильной связи. В этом ее отличие от теории со стабильной частицей, которая в пределе сильной связи переходит в теорию дейтона.

§ 4. Взаимодействие частиц N и V

Решим задачу о взаимодействии двух тяжелых частиц V и N^*). При этом мы покажем, что если выражать ответ через перенормированную массу, то результат не будет содержать бесконечных членов. Более того, в ответ войдет вполне естественным образом перенормированный заряд.

Эту задачу естественно решать в адиабатическом приближении. Это значит, что сначала, пользуясь малостью массы θ по сравнению с m_V и m_N , мы рассчитаем волновую функцию θ при фиксированных N и V , находящихся на расстоянии b . Энергия такого «состояния» зависит от b как от параметра и может рассматриваться как потенциальная энергия взаимодействия V и N , обусловленная «испусканием» и «поглощением» θ -частиц. Далее уже нетрудно решить задачу о движении частиц V и N в этом поле (чего мы делать не будем). Итак, «состояние» V - и N -частиц, находящихся в точках a_1 и a_2 на расстоянии $b = |a_1 - a_2|$ друг от друга, будем описывать операторами $V_1^+(N_1^+)$ и $V_2^+(N_2^+)$ — операторами рождения $V(N)$ -частицы в точках $r = a_1$ и $r = a_2$. Соответственно гамильтониан $H = H_0 + H_1$ запишется так:

$$\left. \begin{aligned} H_0 &= m_0 (V_1^+ V_1 + V_2^+ V_2) + m_N (N_1^+ N_1 + N_2^+ N_2) + \\ &\quad + \int \varphi^+ \left(\mu - \frac{1}{2\mu} \Delta \right) \varphi dr, \\ H_1 &= g \left[V_1^+ N_1 \int \frac{\delta(|r - a_1| - \rho)}{4\pi\rho^2} \varphi(r) dr + \right. \\ &\quad \left. + V_2^+ N_2 \int \frac{\delta(|r - a_2| - \rho)}{4\pi\rho^2} \varphi(r) dr \right] + \text{э. с.} \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

* В импульсном представлении эта задача была решена в работе С. Вейнберга (1956).

Наиболее общий вид физического состояния с одной V - и одной N -частицей на расстоянии $b = a_1 - a_2$ есть

$$|VN\rangle = C_1 V_1^+ N_2^+ |0\rangle + C_2 V_2^+ N_1^+ |0\rangle + \\ + N_1^+ N_2^+ \int \psi(r) \varphi^+(r) dr |0\rangle. \quad (4.2)$$

Так как гамильтониан H инвариантен относительно замены $1 \rightleftharpoons 2$, то собственные «состояния» можно классифицировать по числу $I = \pm 1$, где $C_2 = IC_1$. Энергию «состояния» E запишем в виде

$$E = m_V + m_N + \varepsilon, \quad (4.3)$$

поскольку заранее ясно, что при $b \rightarrow \infty$ энергия $E \rightarrow m_V + m_N$ (при этом $\varepsilon \rightarrow 0$). Решая у. Ш., мы получим

$$\psi(r) = -\frac{\mu g C_1}{2\pi} \left[\frac{e^{-\eta r_1}}{r_1} + I \frac{e^{-\eta r_2}}{r_2} \right], \quad (4.4)$$

$$(m_0 - m_V - \varepsilon) C_1 + g \psi|_{r_1=\rho} = 0, \quad (4.5)$$

где

$$r_1 = |r - a_1|, \quad r_2 = |r - a_2|, \\ \eta^2 = 2\mu(m_N + \mu - m_V - \varepsilon) = \kappa^2 - 2\mu\varepsilon.$$

Подставляя (4.4) в (4.5), мы получим

$$(m_0 - m_V - \varepsilon) = \frac{\mu g^2}{2\pi} \left[\frac{e^{-\eta r_1}}{r_1} + I \frac{e^{-\eta r_2}}{r_2} \right]_{r_1=\rho}, \quad (4.6)$$

или

$$\left(m_0 - m_V + \frac{\eta^2 - \kappa^2}{2\mu} \right) = \frac{\mu g^2}{2\pi} \left[\frac{e^{-\eta r_1}}{r_1} + I \frac{e^{-\eta r_2}}{r_2} \right]_{r_1=\rho}. \quad (4.6')$$

Из этого уравнения можно определить η , а тем самым и ε .

Теперь мы должны рассмотреть переход к $\rho \rightarrow 0$. Разлагая $\psi|_{r_1=\rho}$ в (4.6') по степеням ρ , опустим члены первого и более высоких порядков; тогда

$$\left(m_0 - m_V + \frac{\eta^2 - \kappa^2}{2\mu} \right) = \frac{\mu g^2}{2\pi} \left(\frac{1}{\rho} - \eta + I \frac{e^{-\eta b}}{b} \right). \quad (4.7)$$

При фиксированном m_0 и $\rho \rightarrow 0$ результаты получаются бесконечными.

Вспомним теперь формулу (2.6') для перенормировки массы, где масса m_0 выражена через m_V и $1/\rho$. Тогда (4.7) примет вид

$$\left(\frac{g^2 \mu}{2\pi} \frac{1}{\rho} - \frac{g^2 \mu}{2\pi} \kappa + \frac{\eta^2 - \kappa^2}{2\mu} \right) = \frac{g^2 \mu}{2\pi} \left[\frac{1}{\rho} - \eta + I \frac{e^{-\eta b}}{b} \right].$$

Члены, содержащие $1/\rho$, сокращаются, что и дает возможность устремлять ρ к нулю. Мы получаем уравнение

$$\frac{\eta^2 - \kappa^2}{2\mu} = \frac{\mu}{2\pi} I g^2 \left[1 + g^2 \frac{\mu^2}{\pi(\eta + \kappa)} \right]^{-1} \frac{e^{-\eta b}}{b}. \quad (4.8)$$

Если вместо g подставить его выражение через g_r :

$$g^2 = g_r^2 \left[1 - g_r^2 \frac{\mu^2}{2\pi\kappa} \right]^{-1},$$

то уравнение примет вид

$$-\varepsilon = \frac{\eta^2 - \kappa^2}{2\mu} = I \frac{\mu}{2\pi} g_r^2 \left[1 - g_r^2 \frac{\mu^2 (\eta - \kappa)}{2\pi\kappa (\eta + \kappa)} \right]^{-1} \frac{e^{-\eta b}}{b}. \quad (4.8')$$

Уравнения (4.8) или (4.8') определяют энергию «системы» (VN) при заданном расстоянии. Из них видно, что при $I = +1$ частицы V и N притягиваются: $E - (m_V + m_N) = \varepsilon = \frac{\kappa^2 - \eta^2}{2\mu} < 0$, при $I = -1$ — отталкиваются.

При $b \gg \kappa$ потенциал $\varepsilon(b)$ приближенно описывается формулой Юкавы

$$\varepsilon = -I \frac{\mu}{2\pi} g_r^2 \frac{e^{-\kappa b}}{b}. \quad (4.9)$$

Таким образом, потенциал взаимодействия $U(b) \equiv \varepsilon(b)$ частиц N и V зависит от того, в симметричном (в частности, s -волна) или антисимметричном (в частности, p -волна) состояниях находятся N - и V -частицы. Это неудивительно, поскольку взаимодействие, обусловленное обменом частицей θ , приводит как к обычным, так и к обменным силам. Заметим здесь же, что наличие двух различных потенциалов не приводит к неортого-

нальности волновых функций, поскольку волновые функции, являющиеся решениями у. Ш. с различными $U(r)$, обладают различной симметрией и потому оказываются автоматически ортогональными друг другу.

§ 5. Векторное взаимодействие

Предположим, что фермионы V и N имеют спин $1/2$, а бозоны θ имеют нулевой спин. Тогда волновые функции V и N зависят еще и от спиновой переменной. При $s = 1/2$ эти волновые функции являются двухкомпонентными. В соответствии с общепринятым способом задания спиновых функций мы будем считать, что первая компонента отвечает состоянию $s_z = +1/2$, вторая $s_z = -1/2$. Будем отмечать эти компоненты индексами a, b . Соответственно этому следует ввести операторы рождения частиц в состояниях со спином, направленным вверх и вниз:

$$N_a^+, V_a^+ - s_z = +\frac{1}{2}, \quad N_b^+, V_b^+ - s_z = -\frac{1}{2}.$$

Плотность гамильтониана взаимодействия h , отвечающего реакции $V \rightleftharpoons N\theta$, есть скалярная величина, которую мы теперь должны построить из произведения спинора N , эрмитово сопряженного спинора V^+ и скаляра ϕ . Одна возможность — взять сумму произведений одноименных компонент N и V^+ (известно, что такая сумма есть скаляр) и умножить на ϕ :

$$h_1 = g(V_a^+ N_a + V_b^+ N_b) \phi + \text{э. с.} \quad (5.1)$$

Легко видеть, что такое взаимодействие ничем не отличается от рассмотренного нами скалярного взаимодействия. Действительно, если в начальный момент времени все частицы находились в состоянии со спином, направленным вверх, то и в дальнейшем они будут иметь спин, направленный вверх. Частицы с противоположными направлениями спинов не взаимодействуют; сохраняются отдельно спиновый и отдельно орбитальный моменты количества движения.

Вторая возможность ввести взаимодействие, отвечающее той же реакции и не зависящее от импульсов V

и N (т. е. от пространственных производных $V(r)$ и $N(r)$) — подействовать на спинор N оператором вектора спина $s = \sigma/2$ и полученный спинор умножить на эрмитово сопряженный спинор V^+ . Величина V^+sN есть вектор, и поэтому для получения скалярной плотности гамильтониана ее нужно скалярно умножить на вектор $\nabla\varphi$. Запишем более подробно, что такое $V^+sN\nabla\varphi$, вводя для этой скалярной величины обозначение h_2 . Мы имеем

$$sa = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_z & a_x - ia_y \\ a_x + ia_y & -a_z \end{pmatrix},$$

$$h_2 = V^+sN\nabla\varphi = \frac{1}{2} \left[V_a^+N_a \frac{\partial}{\partial z} + V_a^+N_b \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) + V_b^+N_a \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - V_b^+N_b \frac{\partial}{\partial z} \right] \varphi(r). \quad (5.2)$$

Гамильтониан взаимодействия мы получим, умножая h_2 на константу взаимодействия f , складывая с эрмитово сопряженным выражением и интегрируя по объему:

$$H_2 = \int [fh_2(r) + \text{э. с.}] dr. \quad (5.3)$$

Для того чтобы такой гамильтониан был инвариантен относительно инверсии координат, т. е. чтобы сохранялась четность, необходимо считать произведение трех волновых функций $\psi_V^*\psi_N\psi_\theta$ псевдоскаляром, так как оператор $s\nabla$ псевдоскаляр (последнее следует из того, что спин s есть псевдовектор). Для этого достаточно, например, считать ψ_θ псевдоскаляром, а ψ_V и ψ_N — настоящими (не псевдо) спинорами. Заметим, однако, что если бы модель Ли соответствовала экспериментально наблюдаемым фактам, мы никак не смогли бы установить в отдельности четности V , N и θ , наблюдая только реакции, описываемые гамильтонианами H_1 и H_2 . Из таких наблюдений можно определить лишь произведение их четностей (+1 для H_1 и -1 для H_2), так как из-за законов сохранения n_1 и n_2 во всех реакциях на одну V -частицу с одной стороны «равенства» приходится по одной N и θ с другой стороны. Аналогично этому мы не можем установить абсолютную четность протона (или нейтрона), где в термине «абсолютная

четность» содержится определение, по которому четность вакуума принимается положительной. Это происходит потому, что во всех реакциях с участием нуклона сохраняется барионный заряд, и мы можем установить лишь произведение четностей частиц, принимающих участие в реакции. В то же время четность π^0 -мезона (равная -1) может быть определена абсолютно, так как точные законы сохранения не препятствуют реакции типа $N \rightarrow N + \pi^0$ (здесь N — нуклон). Конкретно для π^0 -мезона четность может быть определена также по тому, как он распадается на два γ -кванта. Здесь заключение о четности π^0 -мезона делается по соотношению между поляризациями двух γ -квантов независимо от того, какую четность мы приписываем самому электромагнитному полю (четность системы двух γ -квантов с нулевым суммарным импульсом равна +1 при параллельных и -1 при перпендикулярных поляризациях). Четность же π^+ - и π^- -мезонов принимается такой же, как и у π^0 -мезона — отрицательной, исходя из соображений о том, что эти три частицы образуют изотопический мультиплет.

Резюмируя сказанное, можно заключить, что определение абсолютной (т. е. относительно вакуума) четности возможно лишь для тех частиц, у которых сохраняющиеся квантовые числа такие же, как и у вакуума (именно таким является π^0), и притом только тогда, когда распад частицы зависит от взаимодействия, сохраняющего четность.

Возвращаясь к векторному взаимодействию, запишем H_2 в импульсном представлении, опуская k -индексы у V и N и не выписывая множителя $\delta(k_1 - k_2 - k_3)$, отвечающего за закон сохранения импульса:

$$H_2 = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{k} \left[ifV^+(s\mathbf{k})N\varphi_{\mathbf{k}} + \text{э. с.} \right],$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{k} &= \{k \sin \theta \cos \varphi, k \sin \theta \sin \varphi, k \cos \theta\}, \\ ifV^+(s\mathbf{k})N\varphi_{\mathbf{k}} &= if \frac{k}{2} (V_a^+N_a \cos \theta + V_a^+N_b \sin \theta e^{-i\varphi} + \\ &\quad + V_b^+N_a \sin \theta e^{i\varphi} - V_b^+N_b \cos \theta) \varphi_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \right\} \quad (5.4)$$

Как и в скалярном случае, состояния свободного движения θ -частицы $\varphi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle$ и N -частицы $(c_1N_a^+ + c_2N_b^+) |0\rangle$

остаются собственными состояниями полного гамильтониана $H_0 + H_2$. Состояние же физической V -частицы (например, со спином вверх) ищем в виде «голой» V со спином вверх и облака N и θ :

$$|V_a\rangle = Z^{1/2} \left\{ V_a^+ |0\rangle + \int d\mathbf{k} [\psi_a(\mathbf{k}) N_a^+ + \psi_b(\mathbf{k}) N_b^+] \varphi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle \right\}. \quad (5.5)$$

Так же как и для скалярного взаимодействия, считаем сначала $\psi_a(\mathbf{k})$ и $\psi_b(\mathbf{k})$ в первом порядке теории возмущений и с теми же оговорками относительно m_0 и m_V . Мы получим

$$\left. \begin{aligned} \psi_a(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{k}{2} \frac{if \cos \theta}{E(k) - m_V} = \\ &= \frac{k}{(2\pi)^{3/2}} \frac{if\sqrt{\pi}}{E(k) - m_V} \left[-\sqrt{\frac{1}{3}} Y_{1,0}(\theta, \varphi) \right], \\ \psi_b(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{k}{2} \frac{if \sin \theta e^{i\varphi}}{E(k) - m_V} = \\ &= \frac{k}{(2\pi)^{3/2}} \frac{if\sqrt{\pi}}{E(k) - m_V} \left[+\sqrt{\frac{2}{3}} Y_{1,+1}(\theta, \varphi) \right], \end{aligned} \right\} \quad (5.6)$$

где

$$E(k) = m_N + \mu + k^2/2\mu.$$

Множители $\cos \theta$ и $\sin \theta e^{i\varphi}$ дают сохранение момента количества движения: V -частица со спином вверх распадается на N со спином вверх и θ с $l=1, m=0$ или на N со спином вниз и θ с $l=1, m=+1$. Сохранение j_z было, конечно, очевидно заранее, так как гамильтониан инвариантен относительно вращений. Невозможность же превращения V_a^+ в N_a и θ с $l=0$ следует из того, что четность P такого состояния, равная произведению четности P_l координатной функции θ ($P_l = (-1)^l$) на внутреннюю четность $P_\theta = -1$, отрицательна для $l=0$, в то время как для V -частицы четность равна $+1$.

Таким образом, часть времени V -частица проводит в виде N и θ в p -состоянии ($l=1$). Ясно, что оба слагаемых в (5.6) относятся к одному и тому же значению j^2 , и поскольку для $V_a^+ |0\rangle$ $j=1/2$, то всему состоянию следует приписать $j=1/2$. Это можно заключить и по значению коэффициентов Клебша — Гордана, равных $+\sqrt{\frac{2}{3}}$ и $-\sqrt{\frac{1}{3}}$. Таким образом, в ту долю времени,

когда физическая V -частица состоит из N и θ , орбитальное движение θ соответствует состоянию $P_{1/2}$ системы N и θ .

Отметим, что облако θ вокруг N в состоянии $P_{1/2}$ сферически-симметрично (если взять сумму по обоим значениям спина N -частицы). Поэтому, если θ несет электрический заряд, то, несмотря на векторный характер взаимодействия, V -частица благодаря взаимодействию не приобретает электрического дипольного момента. Это есть прямое следствие сохранения четности: связь между полярным вектором дипольного электрического момента и аксиальным вектором спина не может быть инвариантной относительно инверсии.

В случае нестабильной V -частицы волновые функции $\psi_a(k, \theta, \varphi)$ и $\psi_b(k, \theta, \varphi)$ характеризуют распределение разлетающихся продуктов распада — N и θ — по углам. И в этом случае распределение вылетающих θ -частиц сферически-симметрично. Отметим, однако, что для вылетающих под данным углом N -частиц (направление вылета N противоположно направлению вылета θ -частиц) мы знаем не только отношение вероятностей находиться в состояниях с $s_z = +1/2$ и $s_z = -1/2$, но и фазы соответствующих амплитуд. Это значит, что при распаде поляризованных V -частиц (в нашем примере $s_{zV} = +1/2$) вылетающие под любым данным углом (θ_N, φ_N) N -частицы полностью поляризованы. Это утверждение — значительно более сильное, чем утверждение об отношении вероятностей для $s_{zN} = \pm 1/2$. Условимся под направлением спина N понимать то направление, вдоль которого проекция спина N с достоверностью имеет значение $+1/2$; это направление будем характеризовать полярными углами Θ, Φ . Спиновая часть

волновой функции такого состояния пропорциональна

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\Theta}{2} \\ \sin \frac{\Theta}{2} e^{i\Phi} \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Сравнивая это выражение с ψ_a и ψ_b , мы получим

$$\Phi = \varphi_N, \quad \Theta = 2\theta_N. \quad (5.8)$$

То обстоятельство, что выбранный тип H_2 соответствует взаимодействию лишь с волной $p_{1/2}$, можно усмотреть и непосредственно из гамильтониана. Для этого введем операторы

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{k, l, m} &= \frac{k}{(2\pi)^{3/2}} \int Y_{l, m}^*(\theta_k, \varphi_k) \varphi_k d\Omega_k, \\ \varphi_k &= \frac{(2\pi)^{3/2}}{k} \sum_{l, m} \varphi_{k, l, m} Y_{l, m}(\theta_k, \varphi_k), \end{aligned} \right\} \quad (5.9)$$

уничтожающие θ -частицу в состоянии свободного движения с определенным моментом l и его проекцией $l_z = m$, и эрмитово сопряженные им операторы рождения. Здесь $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ — нормированные сферические функции*).

Подставляя в (5.4) выражение (5.9) для φ_k , мы получим после интегрирования по $d\Omega_k$

$$\begin{aligned} H_2 = (2\pi)^{-3/2} \int k dk \left\{ if \sqrt{4\pi} \left[V_a^+ \left(\sqrt{\frac{1}{3}} N_a \varphi_{k, 1, 0} - \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. - \sqrt{\frac{2}{3}} N_b \varphi_{k, 1, +1} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + V_b^+ \left(\sqrt{\frac{2}{3}} N_a \varphi_{k, 1, -1} - \sqrt{\frac{1}{3}} N_b \varphi_{k, 1, 0} \right) \right] + \text{э. с.} \right\}. \quad (5.10) \end{aligned}$$

*). Заметим, что векторы $\varphi_{k, l, m}^+ |0\rangle$ нормированы следующим образом:

$$\langle 0 | \varphi_{k', l', m'} \varphi_{k, l, m}^+ | 0 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Если теперь с помощью коэффициентов Клебша — Гордана (см., например, Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, 1963) ввести операторы уничтожения (рождения) пары N и θ в состоянии с определенными l, j и j_z :

$$\left. \begin{aligned} (N\theta)_n^{l+1/2, l} &= C_{11}^n \varphi_{k, l, n-1/2} N_a + C_{21}^n \varphi_{k, l, n+1/2} N_b, \\ (N\theta)_n^{l-1/2, l} &= C_{12}^n \varphi_{k, l, n-1/2} N_a + C_{22}^n \varphi_{k, l, n+1/2} N_b, \end{aligned} \right\} \quad (5.11)$$

то H_2 запишется так:

$$\begin{aligned} H_2 = - (2\pi)^{-3/2} \int k dk \left\{ if \sqrt{4\pi} \left[V_a^+ (N\theta)_{1/2, 1}^+ + \right. \right. \\ \left. \left. + V_b^+ (N\theta)_{-1/2, 1}^+ \right] + \text{э. с.} \right\}. \quad (5.12) \end{aligned}$$

Это и означает, что с V взаимодействует только волна $p_{1/2}$: волна с $l = 1, j = 1/2$.

Так же как и в скалярном случае, точное решение отличается от первого порядка теории возмущений лишь нормировочным множителем $Z^{1/2}$. Мы имеем уравнения

$$m_0 = m_V + \frac{|f|^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{k^2}{4} \frac{4\pi k^2 dk}{E(k) - m_V}, \quad (5.13)$$

$$Z^{-1} = 1 + \frac{|f|^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{k^2}{4} \frac{4\pi k^2 dk}{[E(k) - m_V]^2}. \quad (5.14)$$

На этот раз оба интеграла расходятся. Причина расходимости интеграла для Z^{-1} очень наглядно выступает при рассмотрении задачи в координатном представлении. Если для s -волны решение в окрестности начала координат ведет себя как r^{-1} и поэтому $\int dr 4\pi r^2 |\psi|^2$ сходится, то для p -волны поведение вблизи $r = 0$ определяется членом, пропорциональным r^{-2} , так что решение не может быть пронормировано именно из-за большой плотности θ -частиц при малых r . Также становится понятным, как размазывание взаимодействия до радиуса $\sim \rho$ приводит к сходимости интегралов, причем видно, как зависят эти интегралы от ρ . Введем теперь

перенормированный заряд $|f_r|^2 = Z|f|^2$. Плотность об- лака θ на конечном расстоянии пропорциональна имен- но $|f_r|^2$. Таким образом, именно $|f_r|^2$ должен являться наблюдаемой величиной.

Существенное отличие этого случая от скалярного взаимодействия заключается в том, что здесь уже при сколь угодно малом $|f_r|^2 \neq 0$ мы получаем

$$|f|^2 = \frac{|f_r|^2}{1 - |f_r|^2 I_1} = -\infty^{-1} = 0,$$

так как $I_1 = +\infty$. Это значит, что при любом $f_r \neq 0$ гамильтониан системы неэрмитов со всеми вытекающими отсюда неприятностями. Для того чтобы не вступать в противоречие с основными принципами квантовой меха- ники, мы должны сохранить гамильтониан эрмитовым, для чего должны ввести обрезание при больших им- пульсах $\Lambda \sim 1/\rho$. Для этого необходимо требовать вы- полнения неравенства

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\Lambda \frac{k^2}{4} \frac{4\pi k^2 dk}{[E(k) - m_\nu]^2} \leq \frac{1}{|f_r|^2}. \quad (5.15)$$

Отсюда ясно, что чем меньше $|f_r|^2$, тем больше допу- стимое значение Λ , тем с большей точностью мы можем считать взаимодействие точечным, локальным. Напри- мер, для квантовой электродинамики (разумеется, фор- мулы там отличаются от (5.15)) это условие запишется так:

$$\Lambda \leq m_e c \cdot e^{137}, \quad (5.16)$$

откуда видно, что мы можем надеяться, что находимся очень далеко от той границы, когда для объяснения экспериментальных фактов потребуется существенное видоизменение теории. Отсюда следует также, что об- наружение нарушения законов квантовой электродина- мики при энергиях, много меньших Λc , означало бы существенную нелокальность теории. Однако при $\Lambda \rightarrow \infty$ мы должны требовать $|f_r|^2 \rightarrow 0$. В релятивистской тео- рии элементарных частиц аналогом этого является тео- рема о «московском нуле» (Л. Д. Ландау, И. Я. Поме- ранчук, 1955), которая утверждает, что при $\Lambda \rightarrow \infty$ на-

блюдаемое взаимодействие обращается в нуль (если допускать к рассмотрению только эрмитовы гамильто- нианы).

Рассеяние в векторном взаимодействии. Рассмотрение рассеяния в векторном взаимодействии отличается от случая скалярного взаимодействия тем, что теперь для получения конечных результатов необходима перенорми- ровка заряда. Рассмотрим рассеяние θ -частицы с на- чальным импульсом $\mathbf{k}_0 = (0, 0, k_0)$ на поляризованной N -частице со спином, направленным вверх (рассмотрение более общего случая не внесет никаких затруднений).

Как обычно, решение уравнения

$$H|A\rangle = E(k_0)|A\rangle \quad (5.17)$$

ищем в виде

$$|A\rangle = N_a^+ \varphi_{\mathbf{k}_0}^+ |0\rangle + \int d\mathbf{k} [\chi_a(\mathbf{k}) N_a^+ + \chi_b(\mathbf{k}) N_b^+ | \varphi_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle + CV^+ |0\rangle]. \quad (5.18)$$

Член $V_b^+ |0\rangle$ можно не включать с самого начала, так как в падающей волне содержатся состояния лишь с $j_z = +1/2$. Получаем следующие уравнения:

$$\left. \begin{aligned} C[m_0 - E(\mathbf{k}_0) - i\varepsilon] = \\ = -(2\pi)^{-3/2} if \left\{ \frac{k_0}{2} + \int d\mathbf{k} \frac{k}{2} [\chi_a(\mathbf{k}) \cos \theta + \chi_b(\mathbf{k}) \sin \theta e^{-i\varphi}] \right\}, \\ [E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_0) - i\varepsilon] \chi_a(\mathbf{k}) = \frac{k}{2} (2\pi)^{-3/2} if^* C \cos \theta, \\ [E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_0) - i\varepsilon] \chi_b(\mathbf{k}) = \frac{k}{2} (2\pi)^{-3/2} if^* C \sin \theta e^{i\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (5.19)$$

Решая их, находим χ_a и C (формула для χ_b аналогична):

$$\chi_a(\mathbf{k}) = C \frac{k}{2} \frac{(2\pi)^{-3/2} if \cos \theta}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_0) - i\varepsilon}, \quad (5.20)$$

$$C = -(2\pi)^{-3/2} if \frac{k_0}{2} \times \\ \times \left[m_0 - E(\mathbf{k}_0) - \frac{|f|^2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{k^2}{4} \frac{4\pi k^2 dk}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_0) - i\varepsilon} \right]^{-1} \quad (5.21)$$

Подставляя в (5.20) и (5.21) выражение для m_0 через перенормированную массу m_V и расходящийся интеграл, мы получим

$$\chi_a = -\frac{k_0 k \cos \theta}{4} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{[E(k_0) - m_V]^{-1}}{E(k) - E(k_0) - i\epsilon} \frac{|f|^2}{1 + |f|^2 I_2}. \quad (5.22)$$

Здесь интеграл

$$I_2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{k^2}{4} \frac{4\pi k^2 dk}{[E(k) - m_V][E(k) - E(k_0) - i\epsilon]} \quad (5.23)$$

все еще расходится при больших k , хотя и слабее, чем интеграл в (5.15). Подставляя же перенормированный заряд, мы добьемся сходимости интеграла

$$I_3 = I_2 - I_1 = [E(k_0) - m_V] \times \\ \times \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{k^2}{4} \frac{4\pi k^2 dk}{[E(k) - m_V]^2 [E(k) - E(k_0) - i\epsilon]}, \quad (5.24)$$

и окончательно амплитуда рассеяния в обычном координатном представлении (см. (5.5)–(5.9)) гл. IV запишется так:

$$\left. \begin{aligned} A_a(\theta, \varphi) &= -\frac{k_0^2 \mu^2 \cos \theta}{4\pi(\kappa^2 + k_0^2)} \frac{|f_r|^2}{1 + |f_r|^2 I_3}, \\ A_b(\theta, \varphi) &= -\frac{k_0^2 \mu^2 \sin \theta e^{i\varphi}}{4\pi(\kappa^2 + k_0^2)} \frac{|f_r|^2}{1 + |f_r|^2 I_3}, \\ I_3 &= \frac{\mu^4}{\pi} \frac{2\kappa^3 - 3\kappa(k_0^2 + \kappa^2) - 2ik_0^3}{k_0^2 + \kappa^2}. \end{aligned} \right\} \quad (5.25)$$

Дифференциальное сечение рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega} = (|A_a|^2 + |A_b|^2)$ при этом оказывается не зависящим от угла.

Подчеркнем, что хотя для эрмитовости гамильтониана обрезание при больших импульсах принципиально необходимо, вычисленные нами амплитуды (5.25) суть пределы при $\Lambda \rightarrow \infty$ амплитуд в теории с обрезанием. Имен-

но благодаря тому, что мы пользуемся перенормированными величинами, зависимость амплитуд от Λ такова, что допускает предельный переход $\Lambda \rightarrow \infty$. Конкретные вычисления, тем более, удобно проводить сразу для предельных значений.

На примере нашей модели удобно рассмотреть также вопрос о поляризации рассеянных частиц.

Начнем со скалярного взаимодействия. Как мы уже отмечали, в этом случае все частицы, которые до столкновения имели какое-то определенное значение поляризации, т. е. направление спина, сохраняют его после столкновения, так как этот тип взаимодействия вообще не зависит от спина. Поэтому при неполяризованных N -частицах в мишени рассеянные N -частицы также неполяризованы. Если частицы N имеют спин по направлению движения, то и рассеянные N имеют спин по первоначальному направлению, т. е. в этом случае при рассеянии поляризации не происходит, но угол между спином и направлением движения меняется.

Для решения задачи в случае векторного взаимодействия полезно заметить, что рассеяние в нашей модели можно рассматривать как образование V -частицы — при столкновении N и θ , — которая затем распадается. Так как в падающей волне θ (ее направление выбираем за ось z) содержатся состояния лишь с $m = 0$, то V -частицы в « a »- и « b »-состояниях рождаются с амплитудами, пропорциональными амплитудам N в состояниях « a » и « b » соответственно. После этого образовавшиеся V -частицы распадаются. Из того факта, что «голая» V -частица взаимодействует лишь с $p_{1/2}$ -волной N , θ следует изотропия рассеяния θ (разумеется, в системе центра инерции) при любом характере и любой степени поляризации первичных N . При этом абсолютная величина сечения не зависит от поляризации. Действительно, любому «чистому», т. е. полностью поляризованному состоянию образовавшейся V можно приписать определенное направление спина. Такая V -частица, как мы видели, распадается с изотропным распределением θ -частиц. Для частично поляризованной мишени из N -частиц, описываемой не волновой функцией, а матрицей плотности (по отношению к спиновым переменным), получаемые V -частицы также

будут описываться матрицей плотности. Так как введение матрицы плотности есть способ усреднения по ансамблю «чистых» невзаимодействующих систем, то изоотропия рассеяния никак не может нарушиться.

Не происходит также и поляризации N -частиц при рассеянии в векторном взаимодействии, если первоначально мишень N была неполяризована. Доказательство состоит в следующем. При распаде состояния $V_a^+|0\rangle$ N -частицы, вылетающие в направлении (θ, φ) , имеют направление спина, определяемое формулой (5.8): при распаде $V_b^+|0\rangle$ вылетающие под тем же углом N -частицы имеют противоположное первому случаю направление спина. Следовательно, если мы в мишени имеем смесь из $N_a^+|0\rangle$ и $N_b^+|0\rangle$ с некоррелированными фазами, то состояния $V_a^+|0\rangle$ и $V_b^+|0\rangle$, а следовательно, и рассеянных N -частиц также будут иметь некоррелированные фазы, откуда и следует отсутствие поляризации N -частиц. Однако при рассеянии на поляризованных N в случае векторного взаимодействия направление поляризации не остается неизменным.

§ 6. Несохранение четности в модели Ли

Первое предположение о том, что при слабых взаимодействиях четность не сохраняется, сразу привело Т. Ли и Чж. Янга (1956) к новым выводам о поведении элементарных частиц, обладающих спином, а именно:

1) о возможности асимметрии распада, при которой вылетающие частицы преимущественно направлены по направлению момента распадающейся частицы или против него, и

2) о возможности существования дипольного момента у элементарной частицы, также параллельного (или антипараллельного) моменту частицы.

Как известно, первый вывод Ли и Янга блестяще подтвердился на опытах по β -распаду ориентированных ядер (Цз. Ву и др., 1957) и μ -мезонов (Р. Гарвин и др., 1957). Предсказанный ими порядок величины дипольного момента лежит за пределами возможности экспериментального обнаружения. Л. Д. Ландау (1957) дал законченную

теорию, соединяющую несохранение четности при распаде заряженных частиц с четностью пространства *).

В теории Ландау несохранение пространственной четности сопровождается сохранением инвариантности теории относительно изменения знака времени ($t \rightarrow -t$). В 1964 г. было получено (Дж. Кристенсон и др.) экспериментальное доказательство того, что T -инвариантность также не является точной. Однако взаимодействие, нарушающее T -инвариантность, по-видимому, слабее, чем взаимодействие, вызывающее несохранение пространственной четности **).

Поэтому представляют определенный интерес выводы из предположений теории Ландау, т. е. выводы, относящиеся к случаю, когда имеется T -инвариантность.

Одним из выводов, сделанных Ландау, является тождественное равенство нулю дипольного момента элементарных частиц. На первый взгляд асимметрия распада неизбежно приводит к наличию дипольного момента: представим себе, например, поляризованный нейтрон с моментом, направленным вверх; можно считать установленным, что такой нейтрон при распаде испускает электроны преимущественно вверх. Пусть теперь такой же поляризованный нейтрон находится в сферически-симметричном поле ядра, и энергетические соотношения таковы, что нейтрон стабилен, распад его стал невозможен. В таком случае, однако, возможен и необходим виртуальный распад, при котором нейтрон на мгновение распадается, испуская электрон, но затем электрон снова поглощается; можно говорить об облаке виртуальных электронов вокруг ядра.

Казалось бы, асимметрии реального распада должна соответствовать также и асимметрия виртуального

*) Предположение о возможности сочетания зеркального отражения с переходом к античастицам независимо высказали также Ли и Янг.

***) Детальное рассмотрение свойств T -неинвариантного взаимодействия можно найти в обзорах (М. В. Терентьев, 1965; Л. Б. Окунь, 1966). Заметим здесь же, что обнаружение электрического дипольного момента частицы (например, электрона или ядра), входящей в состав нейтрального атома, затруднено тем, что, как показал Л. Шифф (1963), учет экранировки приводит к отсутствию эффекта первого порядка по электрическому дипольному моменту.

распада, асимметрия облака виртуальных электронов, а следовательно, и дипольный момент. Работа Ландау в общей форме указывает на ошибочность таких примитивных представлений. В работе Б. Л. Иоффе (1957) выявлена зависимость асимметрии распада и дипольного момента от предположений об инвариантности теории относительно обращения времени. Суть дела сводится к тому, что предположение о линейной связи импульса вылетающей частицы k и направления поляризации (направления спина) распадающейся частицы s согласуется с обращением времени: обе величины меняют знак. Статический дипольный момент \mathbf{d} или аналогичная ему статическая величина — координата центра тяжести облака виртуальных частиц \mathbf{r} — не меняет знака при обращении времени. Поэтому связь между спином s и статическими величинами \mathbf{r} и \mathbf{d} возможна лишь в теории, инвариантной относительно обращения времени.

Рассмотрим в нашей модели превращение частицы V в N с испусканием θ -частицы в предположении о несохранении четности (спин частиц V и N равен $1/2$). Здесь удастся весьма наглядно выяснить зависимость асимметрии распада поляризованной частицы со спином $1/2$ от фаз констант связи в выражении взаимодействия, обуславливающего распад.

Оказывается, что в первом приближении асимметрия распада зависит от мнимой части константы векторной связи, а дипольный момент — от вещественной части этой константы, так что между асимметрией распада и дипольным моментом нет прямой связи (Я. Б. Зельдович, 1957).

Мы уже отмечали, что для инвариантности полного гамильтониана относительно инверсии координат необходимо считать произведение четностей V , N и θ положительным для скалярного (H_1) взаимодействия и отрицательным для векторного (H_2). Отсюда следует, что гамильтониан, содержащий одновременно и H_1 и H_2 , не может быть сделан инвариантным относительно инверсии. Поэтому до 1956 г. — до открытия несохранения четности — требование инвариантности относительно инверсии запрещало вводить в гамильтониан сумму $H_1 + H_2$. В действительности для слабых взаимодействий, в кото-

рых четность не сохраняется, необходимо исследовать именно такое выражение $H_{\text{вз}} = H_1 + H_2$.

Рассмотрим распад $V \rightarrow N + \theta$. Задачу будем рассматривать в первом порядке теории возмущений, и поэтому будем пренебрегать обратным процессом $\theta + N \rightarrow V$. Поскольку вопросы перенормировки нас не интересуют, мы не делаем здесь различия между m_0 и m_V .

В этой задаче оказывается более удобным пользоваться координатным представлением. Произведем в явном виде выделение движения центра масс. Волновую функцию V -частицы возьмем в виде плоской волны, причем будем считать, что спин V направлен вверх:

$$|V\rangle = \int e^{ikr_1} V_a^+(r_1) dr_1 |0\rangle. \quad (6.1)$$

Оператор $H_{\text{вз}} = H_1 + H_2$ будет превращать это состояние в состояние с N - и θ -частицами

$$|N, \theta\rangle = \sum_{i=a, b} \int \int \Psi_i(r_2, r_3) N_i^+(r_2) \varphi^+(r_3) dr_2 dr_3 |0\rangle \quad (6.2)$$

(i — спиновый индекс N).

Уравнения первого порядка теории возмущений имеют обычный вид:

$$H_{\text{вз}} |V\rangle = [E_V(k) - H_0] |N\theta\rangle, \quad (6.3)$$

где H_0 взят из (2.1), а $E_V(k) = m_V + k^2/2m_V$. Запишем $H_{\text{вз}}$ более подробно:

$$H_{\text{вз}} = \int \int \int \left\{ V_i(r_1) \left[g N_i^+(r_2) \varphi(r_3) + f \sigma_{ik} N_k^+(r_2) \frac{\partial}{\partial r_3} \varphi^+(r_3) \right] + \text{э. с.} \right\} \delta(r_1 - r_2) \delta(r_2 - r_3) dr_1 dr_2 dr_3. \quad (6.4)$$

Уравнения для $\Psi_a(r_2, r_3)$, $\Psi_b(r_2, r_3)$ будут следующими:

$$\left. \begin{aligned} [E_V(k) - m_N - \mu + \frac{1}{2m_N} \Delta_{r_2} + \frac{1}{2\mu} \Delta_{r_3}] \Psi_a(r_2, r_3) = \\ = e^{ikr_2} \left[g \delta(r_2 - r_3) + \frac{f}{2} \frac{\partial}{\partial z_3} \delta(r_2 - r_3) \right], \\ [E_V(k) - m_N - \mu + \frac{1}{2m_N} \Delta_{r_2} + \frac{1}{2\mu} \Delta_{r_3}] \Psi_b(r_2, r_3) = \\ = e^{ikr_2} \frac{f}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_3} + i \frac{\partial}{\partial y_3} \right) \delta(r_2 - r_3). \end{aligned} \right\} \quad (6.5)$$

Обычной заменой

$$\mathbf{R} = \frac{m_N \mathbf{r}_2 + \mu \mathbf{r}_3}{\mu + m_N},$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2$$

мы разделим переменные

$$\psi_i(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \psi_i(\mathbf{r}),$$

и для $\psi_i(\mathbf{r})$ получатся у. Ш. с правой частью, только вместо μ будет стоять приведенная масса N и θ . Считая теперь, что через μ обозначена именно эта величина, мы можем написать

$$\left. \begin{aligned} \Delta \psi_a + 2\mu E \psi_a &= 2\mu \left[g \delta(\mathbf{r}) + \frac{f}{2} \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r}) \right], \\ \Delta \psi_b + 2\mu E \psi_b &= 2\mu \frac{f}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \delta(\mathbf{r}). \end{aligned} \right\} \quad (6.6)$$

Здесь E — энергия, выделяющаяся при распаде.

При $E > 0$ распад возможен; при этом вылетают θ -частицы с импульсом $p = \sqrt{2\mu E}$. На большом расстоянии от источника решение должно представлять собой расходящуюся волну, $\psi \sim e^{ipr}/r$. Действительно, в этом случае

$$\left. \begin{aligned} \psi_a &= -\frac{1}{4\pi} \left[g \frac{e^{ipr}}{r} + \frac{f}{2} \cos \theta \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{ipr}}{r} \right) \right], \\ \psi_b &= -\frac{1}{4\pi} \frac{f}{2} e^{i\varphi} \sin \theta \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{ipr}}{r} \right). \end{aligned} \right\} \quad (6.7)$$

При $pr \gg 1$

$$\left. \begin{aligned} \psi_a &= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ipr}}{r} \left[g + \frac{ipf}{2} \cos \theta \right], \\ \psi_b &= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ipr}}{r} \frac{ipf}{2} e^{i\varphi} \sin \theta. \end{aligned} \right\} \quad (6.8)$$

При $E < 0$ реальный распад невозможен. Виртуальный распад описывается решением, которое должно экспоненциально убывать с расстоянием как $e^{-\kappa r}/r$, где

$\kappa^2/2m = -E$. Здесь мы получим

$$\left. \begin{aligned} \psi_a &= -\frac{1}{4\pi} \left[g \frac{e^{-\kappa r}}{r} + \frac{f}{2} \cos \theta \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{-\kappa r}}{r} \right) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \left[g - \frac{f}{2} \kappa \cos \theta \left(1 + \frac{1}{\kappa r} \right) \right], \\ \psi_b &= -\frac{1}{4\pi} \frac{f}{2} e^{i\varphi} \sin \theta \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{-\kappa r}}{r} \right) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{f}{2} \frac{e^{-\kappa r}}{r} e^{i\varphi} \sin \theta \left(1 + \frac{1}{\kappa r} \right). \end{aligned} \right\} \quad (6.9)$$

Эти выражения позволяют судить об асимметрии распада и об асимметрии облака виртуальных частиц в случае, когда распад не имеет места. Характерно появление двух членов в выражении для ψ_a : переход V -частицы в состоянии с $s_z = +1/2$ в N -частицу с $s_z = +1/2$ может сопровождаться образованием θ -частицы как в состоянии s -волны ($l = 0$), так и в состоянии p -волны ($l = 1, m = 0$). Именно интерференция двух членов ψ_a и дает интересные нас члены, линейные по $\cos \theta$, связанные с направлением спина распадающейся V -частицы (θ есть угол между направлением поляризации частицы V (осью z) и направлением радиуса-вектора \mathbf{r}).

Волновая функция ψ_b соответствует переходу V , $s_z = +1/2$ в N , $s_z = -1/2$ и описывает θ -частицу в p -состоянии, $l = 1, m = +1$.

Поскольку ψ_a и ψ_b связаны с различными ортогональными состояниями N -частицы (спин вверх и спин вниз), между ψ_a и ψ_b интерференции нет.

Составим выражение потока θ -частиц при больших r для случая $E > 0$:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{1}{2\mu i} (\psi_a^* \nabla \psi_a - \psi_a \nabla \psi_a^* + \psi_b^* \nabla \psi_b - \psi_b \nabla \psi_b^*) = \\ &= \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{k}{r^2 \mu} \frac{r}{r} \left[|g|^2 + \frac{k^2}{4} |f|^2 + \frac{ik}{2} (fg^* - f^*g) \cos \theta \right]. \end{aligned} \quad (6.10)$$

В случае $E < 0$ представляет интерес только распределение плотности ρ виртуально рожденных θ -частиц, так

как поток на бесконечности равен нулю:

$$\rho = \psi_a^* \psi_a + \psi_b^* \psi_b = \frac{e^{-2\kappa r}}{r^2} \frac{1}{(4\pi)^2} \left[|g|^2 + \frac{\kappa^2}{4} |f|^2 \left(1 + \frac{1}{\kappa r}\right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{\kappa}{2} \left(1 + \frac{1}{\kappa r}\right) (fg^* + f^*g) \cos \theta \right]. \quad (6.11)$$

Выражения (6.10) и (6.11) содержат основной результат; они указывают на отсутствие гождественной связи между асимметрией распада и асимметрией облака виртуальных частиц: одна зависит от $g^*f - gf^*$, другая — от $g^*f + gf^*$.

Примем константу g скалярной связи вещественной (это всегда можно сделать калибровочным преобразованием). Легко видеть, что гамильтониан

$$H_2 = \int dkifV^+(\sigma k) N\varphi_k + \text{э. с.} \quad (6.12)$$

при операции обращения времени T переходит в

$$T^{-1}H_2T = - \int dkif^*V^+(\sigma k) N\varphi_k + \text{э. с.}, \quad (6.12')$$

поскольку при операции обращения времени меняют знак одновременно импульс k и спин σ , и необходимо производить замену s -чисел на комплексно сопряженные (антиунитарность оператора T). Таким образом, T -инвариантность и, как следствие ее, отсутствие дипольного момента будут иметь место именно при чисто мнимой f : тогда $T^{-1}H_2T = H_2$.

Асимметрия распада зависит от мнимой части f и равна нулю при вещественной константе f .

Наоборот, при мнимой f распад асимметричен, но в плотности виртуальных частиц член с $\cos \theta$ исчезает, распределение их сферически-симметрично, а дипольный момент отсутствует.

Можно рассмотреть более общий случай, когда между N и θ есть дополнительное взаимодействие, описываемое потенциалом (например, кулоновское), сверх того взаимодействия, которое обуславливается превращением $N + \theta \rightleftharpoons V$. Если не пренебрегать действием потенциала на θ -частицы, но считать его сферически-симметричным, то вывод об отсутствии дипольного момента при

мнимой f сохраняется: в уравнении вещественному члену g соответствует сферически-симметричное вещественное решение, мнимому члену $i|f|\cos \theta$ соответствует также мнимое, пропорциональное $|f|\cos \theta$ решение, и интерференционные члены, пропорциональные $\cos \theta$, в выражении для плотности по-прежнему отсутствуют.

Однако в случае вещественной f , когда при отсутствии потенциала асимметрия распада отсутствует, в следующем приближении асимметрия распада появляется: с учетом $U(r)$ в выражении для расходящейся волны фаза s -волны и фаза p -волны изменяются на различные величины α_s и α_p *) и для волновой функции ψ_a при $pr \gg 1$ получается асимптотическое выражение

$$\psi_a = a' \exp(ikr + i\alpha_s)/r + ik \cos \theta \cdot b' \exp(ikr + i\alpha_p)/r \quad (6.13)$$

и при вещественной f

$$j = \frac{k}{mr^2} [(a')^2 + k^2 (b')^2 + 2a'b' \cos \theta \sin(\alpha_s - \alpha_p)]. \quad (6.14)$$

Здесь a' и b' пропорциональны соответственно g и f , причем коэффициенты пропорциональности вещественны. В отсутствие потенциала, но при протяженном источнике и вещественных g и f вывод об отсутствии асимметрии распада сохраняется.

§ 7. Электрический дипольный момент нестабильной частицы**)

В предыдущем параграфе уже говорилось о том, что в T -инвариантной теории стабильная частица не может иметь электрического дипольного момента. Однако это утверждение, как впервые было показано в работе

*) Величины α_s и α_p суть зависящие от потенциала $U(r)$ изменения фазы регулярного решения однородного уравнения для s - и p -волн по сравнению с s - и p -волнами свободной частицы, для которой

$$\psi_s = \frac{\sin kr}{r}, \quad \psi_p = \cos \theta \left(\frac{\cos kr}{r} - \frac{\sin kr}{kr^2} \right).$$

**) В этом параграфе излагаются результаты работы А. М. Переломова (1962).

Я. Б. Зельдовича (1960), нельзя распространить на нестабильные частицы. В самом деле, нестабильная частица характеризуется экспоненциально затухающей амплитудой состояния и окружена расходящейся волной разлетающихся продуктов распада. При изменении знака времени нестабильная частица превращается не в такую же частицу с противоположным направлением спина, а в нечто совершенно иное — в состояние с экспоненциально возрастающей амплитудой, окруженное сталкивающимися продуктами распада. Поэтому доказательство отсутствия дипольного момента не распространяется на нестабильные частицы.

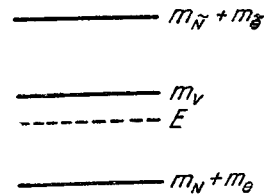


Рис. 46.

В работе Дж. Белла (1962), посвященной этому вопросу, делается утверждение об отсутствии электрического дипольного момента у нестабильной частицы. Однако при этом существенно используется определение нестабильной частицы, физический смысл которого не вполне ясен.

Строгий подход к этому вопросу заключается в изучении рассеяния стабильных частиц, проходящего через нестабильное промежуточное состояние. Рассмотрим мысленный опыт, в котором электрический дипольный момент нестабильной частицы в промежуточном состоянии вызывает поворот спина стабильных рассеивающихся частиц. При этом будет показано, что в стационарной задаче в силу T -инвариантности теории поворот спина отсутствует. При рассеянии же волнового пакета возникает поворот спина, однако такой, что средний по времени поворот спина равен нулю, но отличен от нуля первый момент поворота по времени.

Для простоты мы будем считать, что нестабильная частица нейтральна и распадается на нейтральные частицы, на которые электрическое поле не действует. Вместе с тем модель должна содержать заряженные частицы, на которые должно действовать электрическое поле. Такая модель была предложена в работе Я. Б. Зельдовича (1960). Это модель с пятью частицами θ , N , V , \bar{N} и $\bar{\theta}$. Частицы θ и $\bar{\theta}$ здесь имеют спин 0; N , \bar{N}

и V — спин $1/2$; θ , N и V нейтральны; частица \bar{N} заряжена положительно, частица $\bar{\theta}$ — отрицательно. Массы частиц выберем такими, чтобы частица V могла виртуально распадаться на частицы $\bar{\theta}$ и \bar{N} , причем четность в этом распаде не сохраняется. Пусть также V распадается реально на θ и N ($m_{\theta} + m_N < m_V < m_{\bar{\theta}} + m_{\bar{N}}$).

Схема термов такой системы изображена на рис. 46, энергия частиц N и θ показана пунктиром. Поместим систему в электрическое поле напряженности F , направленное по оси z . Такая система описывается гамильтонианом

$$\begin{aligned}
 H = & m_N \int N^+(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + m_{\bar{N}} \int \bar{N}^+(\mathbf{r}) \bar{N}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\
 & + m_0 \int V^+(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int \Phi_{\theta}^+(\mathbf{r}) \left(\mu - \frac{\Delta}{2\mu} \right) \Phi_{\theta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\
 & + \int \Phi_{\bar{\theta}}^+(\mathbf{r}) \left(\bar{\mu} - \frac{\Delta}{2\bar{\mu}} \right) \Phi_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\
 & + \left[f \int V^+(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}) \Phi_{\theta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + g \int V^+(\mathbf{r}) \bar{N}(\mathbf{r}) \Phi_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \text{э. с.} \right] + \\
 & + ih \int V^+(\mathbf{r}) \sigma \bar{N}(\mathbf{r}) \frac{d\Phi_{\bar{\theta}}}{dr} d\mathbf{r} + \text{э. с.} + \\
 & + F \int \psi_{\bar{N}}(\mathbf{r}) z \psi_{\bar{N}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - F \int \psi_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}) z \psi_{\bar{\theta}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (7.1)
 \end{aligned}$$

В теории, инвариантной по отношению к инверсии времени, $f^* = f$, $g^* = g$, $h^* = h$. Вектор состояния имеет вид

$$\begin{aligned}
 \Phi = & \int \left[\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) N^+(\mathbf{r}_1) \Phi_{\theta}^+(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \int \varphi(\mathbf{r}_1) V^+(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 + \right. \\
 & \left. + \int \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \bar{N}^+(\mathbf{r}_1) \Phi_{\bar{\theta}}^+(\mathbf{r}_2) \right] d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 | 0 \rangle, \quad (7.2)
 \end{aligned}$$

и в системе центра инерции уравнения $H\Phi = E\Phi$ можно записать так:

$$E\psi = \left(m_N + \mu - \frac{\Delta}{2\mu} \right) \psi + f\delta(\mathbf{r})\varphi, \quad (7.3)$$

$$E\chi = \left(m_{\bar{N}} + \bar{\mu} - \frac{\Delta}{2\bar{\mu}} \right) \chi + Fz\chi + (g + ih\sigma\nabla) \delta(\mathbf{r})\varphi, \quad (7.4)$$

$$E\varphi = m_0\varphi + (g + ih\sigma\nabla) \chi(\rho) + f\psi(\rho), \quad (7.5)$$

где m_0 — неперенормированная масса частицы V , ρ — радиус обрезания, который после перенормировки устремляем к нулю.

В первом приближении пренебрегаем Fz . Находим экспоненциальное решение с комплексной энергией $E_0 = \varepsilon - i\gamma/2$. Действительная и мнимая части E_0 определяют соответственно массу частицы V и вероятность ее распада. Для упрощения формул мы будем считать константу несохранения четности и распадную константу малыми и пренебрегать членами с f^4 , h^2 и т. д. Кроме того, считаем $\gamma/2 \ll m_{\tilde{N}} + \tilde{\mu} - \varepsilon$, $\gamma/2 \ll \varepsilon - m_N - \mu$, что приводит к ограничениям

$$2\mu f^2 \ll \frac{\kappa_0^2}{2\tilde{\mu}k_0}, \quad 2\mu f^2 \ll \frac{k_0^2}{2\mu k_0}.$$

Здесь и в дальнейшем используются обозначения

$$\kappa^2 = 2\tilde{\mu}(m_{\tilde{N}} + \tilde{\mu} - E), \quad k^2 = 2\mu(E - m_N - \mu),$$

$$\kappa_0^2 = 2\tilde{\mu}(m_{\tilde{N}} + \tilde{\mu} - \varepsilon), \quad k_0^2 = 2\mu(\varepsilon - m_N - \mu).$$

С помощью (7.3) — (7.5) получаем

$$m_0 = \varepsilon + \frac{\tilde{\mu}g^2}{2\pi} \frac{1}{\rho} + \frac{\mu f^2}{2\pi} \frac{1}{\rho} - \frac{\tilde{\mu}g^2}{2\pi} \kappa_0, \quad (7.6)$$

$$\gamma = \frac{\mu f^2 k_0 / \pi}{1 + \frac{\tilde{\mu}g^2}{2\pi} \frac{\tilde{\mu}}{\kappa_0}}. \quad (7.7)$$

Отметим, что если второй член в знаменателе (7.7) много больше единицы, т. е. связь между частицами \tilde{N} , $\tilde{\theta}$ и V достаточно сильная, то

$$\gamma \approx 2 \frac{\mu f^2}{\tilde{\mu}g^2} \frac{k_0 \kappa_0}{\tilde{\mu}}, \quad (7.8)$$

т. е. происходит сильное уменьшение вероятности распада частицы V . Если же частица V может превращаться в другие частицы \tilde{N} и $\tilde{\theta}$ и т. д., то это приводит к добавлению к знаменателю новых положительных членов и к еще большему уменьшению этой вероятности. Этот эффект в принципе может быть использован для объяснения малой ширины некоторых экспериментально наблюдаемых резонансов.

Учтем теперь Fz в первом порядке. Определяя ψ и χ из уравнений (7.3) и (7.4) и подставляя в уравнение (7.5),

получим, что поправки к E_0 , линейной по F , нет. При этом выражение для δE_0 получается таким же, как и в теории возмущений для комплексного E_0 (П. Капур, Р. Пайерлс, 1938; Я. Б. Зельдович, 1960), $\delta E_0 = F \int \tilde{\psi}_0^* \psi_0 z dr = 0$. То обстоятельство, что $\delta E_0 = 0$, означает на первый взгляд нарушение третьего закона Ньютона (действие равно противодействию). В самом деле, нестабильная частица создает дипольное электрическое поле, так как $\int \psi_0^* \psi_0 z dV \neq 0$, а однородное электрическое поле не вызывает прецессии ее спина вокруг направления поля, так как нет расщепления $\delta E_0 = 0$. Однако это противоречие кажущееся и означает только то, что с нестабильными частицами нельзя обращаться так же, как со стабильными. Если же мы будем считать, что в начале и конце процесса имеем стабильные частицы, т. е. не отделяем процесс образования от процесса распада, то такой парадокс не возникает.

Эффект прецессии может проявиться в случае рассеяния частицы θ на N . Если до рассеяния частица N поляризована по оси z , а электрическое поле направлено по оси x , то можно ожидать, что после рассеяния поляризация ее поворачивается в плоскости yz на некоторый угол α . Для того чтобы этот эффект имел место, необходимо также, чтобы состояние системы θ , N не обладало определенной энергией, т. е. необходимо рассматривать рассеяние волновых пакетов. (Эффект электрического дипольного момента в рассеянии есть эффект типа $[\sigma\sigma']F$ и в силу инвариантности по отношению к комбинированной инверсии исчезает, если система θ , N имеет определенную энергию.) Заметим, что если частица V обладает магнитным моментом и находится в магнитном поле, то уже в стационарном случае есть поворот спина.

$$i \frac{d\psi}{dt} = \left(m_N + \mu - \frac{\Delta}{2\mu} \right) \psi + f\delta(r)\psi, \quad (7.3')$$

$$i \frac{d\chi}{dt} = \left(m_{\tilde{N}} + \tilde{\mu} - \frac{\Delta}{2\tilde{\mu}} \right) \chi + Fz\chi + (g + ih\sigma\nabla) \delta(r)\psi, \quad (7.4')$$

$$i \frac{\partial\varphi}{\partial t} = m_0\varphi + (g + ih\sigma\nabla) \chi(\rho) + f\psi(\rho). \quad (7.5')$$

Начальные условия выберем следующими:

$$\psi(r, 0) = \psi_0(r) \alpha, \quad \chi(r, 0) = 0, \quad \varphi(0) = 0; \quad (7.9)$$

$$\psi_0 = \frac{1}{2 \sqrt{a\pi} \sqrt{\pi}} e^{-i\pi r - \frac{(r-r_0)^2}{2a^2}};$$

$\alpha(\beta)$ означает, что спин частицы направлен вверх (вниз). Подсчитаем:

$$\frac{ds(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \left[\int \psi^* \frac{\sigma}{2} \psi dr + \int \chi^* \left(\frac{\sigma}{2} + [rp] \right) \chi dr + \varphi^* \frac{\sigma}{2} \varphi \right]. \quad (7.10)$$

Используя (7.3')—(7.5'), получаем

$$\frac{ds(t)}{dt} = \int \chi^*(r, t) [Fr] \chi(r, t) dr. \quad (7.11)$$

Интегрируем это равенство по времени от 0 до ∞ :

$$\Delta s = \int \chi^*(r, t) [Fr] \chi(r, t) dr dt. \quad (7.12)$$

Для подсчета величины Δs воспользуемся тем обстоятельством, что функции

$$\psi_k = \frac{1}{2\pi \sqrt{2}} \frac{-e^{-ikr} + S(k) e^{ikr}}{r}, \quad (7.13)$$

$$\chi_k = \frac{1}{2\pi \sqrt{2}} \frac{\bar{\mu}}{\mu} (S(k) - 1) \frac{g + i\hbar\sigma\nabla}{f} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad (7.14)$$

$$\varphi_k = -\frac{S(k) - 1}{\sqrt{2} \mu f} \quad (7.15)$$

образуют полную ортонормированную систему. Здесь

$$S(k) = \frac{(e - E) \left[1 + \frac{\bar{\mu} g^2}{2\pi} \frac{2\bar{\mu}}{\kappa + \kappa_0} \right] + i \frac{\mu f^2 k}{2\pi}}{(e - E) \left[1 + \frac{\bar{\mu} g^2}{2\pi} \frac{2\bar{\mu}}{\kappa + \kappa_0} \right] - i \frac{\mu f^2 k}{2\pi}} \quad (7.16)$$

(формулы приведены для $E < m_{\bar{N}} + m_{\bar{q}}$ при

$$E > m_{\bar{N}} + m_{\bar{q}}, \quad \kappa \rightarrow -i \sqrt{2\bar{\mu}(E - m_{\bar{N}} - m_{\bar{q}})}).$$

Разлагая функции $\psi_0, \psi, \chi, \varphi$ по полной системе, находим, пренебрегая экспоненциально малыми членами, что $\Delta s = 0$. Подсчитаем теперь первый момент поворота спина, т. е. вычислим интеграл

$$\Delta s_1 = \int \frac{ds(t)}{dt} t dt. \quad (7.17)$$

Опуская вычисления, приведем результат:

$$\Delta s_1 = -\frac{F}{3} \frac{\bar{\mu}^3}{\mu^2} \frac{gh}{f^2} \frac{1}{(2\kappa)^3} \frac{\mu}{k} |S(k) - 1|^2. \quad (7.18)$$

С другой стороны, зная экспоненциальное решение, описывающее нестабильную частицу, нетрудно найти электрический дипольный момент:

$$d = \int \psi_0^* z \psi_0 dr = \frac{gh}{4\pi} \frac{2}{3} \frac{\bar{\mu}^3 \gamma}{\kappa_0^3} \frac{1}{1 + \frac{\bar{\mu} g^2}{2\pi} \frac{\bar{\mu}}{\kappa_0}}. \quad (7.19)$$

Воспользовавшись формулой (7.7), получим

$$\Delta s_1 = -\tau (F d \tau) \frac{\kappa_0^3}{\kappa^3} \frac{k_0}{k} \frac{1}{4} |S(k) - 1|^2, \quad \tau = \frac{1}{\gamma}. \quad (7.20)$$

Формула (7.19) соответствует дипольному моменту экспоненциально распадающейся частицы. Дипольный момент оказывается пропорциональным γ , т. е. производной от волновой функции по времени. Учитывая это, мы интерпретируем (7.20) следующим образом: в начале процесса рассеяния, когда амплитуда волновой функции растет, дипольный момент имеет один знак и поворот спина происходит в одну сторону, в конце же процесса рассеяния амплитуда нестабильной частицы падает, дипольный момент имеет другой знак и поворот спина происходит в противоположную сторону. В среднем же по времени поворот спина оказывается равным нулю. При этом знак момента поворота спина, как и следовало ожидать, совпадает со знаком угла поворота распадающейся частицы. Структура полученной формулы также ясна: Δs_1 пропорционально времени жизни частицы τ , величине

поворота спина нестабильной частицы (τFd), резонансному множителю $\frac{1}{4}|S(k) - 1|^2$, равному единице в резонансе, и, наконец, множителю, слабо зависящему от энергии, равному единице в резонансе.

Мы приходим, таким образом, к следующему выводу. Если при рассеянии волнового пакета измерять поляризацию рассеянной частицы как функцию времени (отсчет времени производится от момента приготовления волнового пакета), то следует ожидать, что вектор поляризации вначале поворачивается в одну сторону, а затем в другую.

ПРИЛОЖЕНИЯ

А. Спектр энергий уравнения Шредингера в особых случаях

В этом приложении мы рассмотрим более тонкие вопросы квантовой механики.

Покажем сначала, следуя Г. Вейлю (1910)*), что для потенциалов $V(r)$, регулярных в нуле $\left(\int_0^a V(r)r dr < \infty\right)$,

а в остальном произвольных, имеет место следующая альтернатива:

1) Для любого значения E с $\text{Im } E \neq 0$ существует лишь одно (с точностью до нормировочной постоянной) квадратично интегрируемое решение уравнения (1.6) гл. I. Это случай так называемой предельной точки.

2) При любом E с $\text{Im } E \neq 0$ произвольное решение уравнения (1.6) является квадратично интегрируемым. Это случай так называемого предельного круга. Смысл терминов предельная точка и предельный круг вскоре выяснится.

Перейдем к доказательству сделанных утверждений. Пусть $\chi^{(1)}(r)$ и $\chi^{(2)}(r)$ — решения уравнения (1.6) гл. I на интервале $(0, \infty)$, удовлетворяющие граничным условиям

$$\chi^{(1)}(0) = 0, \quad \chi^{(1)'}(0) = 1; \quad \chi^{(2)}(0) = 1, \quad \chi^{(2)'}(0) = 0. \quad (\text{A.1})$$

Общее решение этого уравнения при соответствующей нормировке имеет вид

$$\chi_k(r) = m_k \chi_k^{(1)}(r) + \chi_k^{(2)}(r). \quad (\text{A.2})$$

*) Более подробно этот вопрос рассмотрен в книгах Э. Титчмарша (1946), Б. М. Левитана (1950), Э. Коддингтона и Н. Левинсона (1955).

Рассматривая $\chi_k(r)$ на интервале $(0, R)$ и накладывая граничное условие

$$\frac{\chi_k'(R)}{\chi_k(R)} = -\kappa, \quad (\text{A.3})$$

получаем

$$m_k(R) = -\frac{\kappa \chi_k^{(2)}(R) + \chi_k^{(2)'}(R)}{\kappa \chi_k^{(1)}(R) + \chi_k^{(1)'}(R)}. \quad (\text{A.4})$$

Поскольку $\chi_k^{(1)}(R)$ и $\chi_k^{(2)}(R)$ определяются уравнением, содержащим k^2 , и граничными условиями (A.1), не зависящими от k , то $\chi_k^{(1)}(R)$ и $\chi_k^{(2)}(R)$ являются целыми функциями k^2 , а $m_k(R)$ — мероморфная функция k^2 , принимающая действительные значения при действительных k^2 . Если k^2 — комплексное число, то величина $m_k(R)$, вообще говоря, также комплексна и может быть изображена точкой на плоскости. Из (A.4) следует, что при изменении κ от $-\infty$ до $+\infty$ эта точка описывает окружность C_R . Нетрудно найти положение центра окружности. Поскольку значению $\kappa = -\chi_k^{(1)'}(R)/\chi_k^{(1)}(R)$ соответствует $m_k = \infty$, то центру окружности соответствует $\kappa = -\chi_k^{(1)'*}(R)/\chi_k^{(1)*}(R)$. Подставляя это значение в (A.4), получаем положение центра окружности

$$m_k^0 = -\frac{W_R[\chi_k^{(2)}, \chi_k^{(1)*}]}{W_R[\chi_k^{(1)}, \chi_k^{(1)*}]}. \quad (\text{A.5})$$

Здесь введено сокращенное обозначение для вронскиана двух функций: $W_R[f, g] = f(R)g'(R) - f'(R)g(R)$, в частности $W_0[f, g]$ есть значение вронскиана при $r = 0$.

Радиус $\rho_k(R)$ окружности C_R можно определить, например, как расстояние между точкой $-\chi_k^{(2)}(R)/\chi_k^{(1)}(R)$, лежащей на окружности, и центром окружности $m_k^{(0)}(R)$:

$$\rho_k(R) = \left| \frac{W_R[\chi_k^{(1)}, \chi_k^{(2)}]}{W_R[\chi_k^{(1)}, \chi_k^{(1)*}]} \right| = \frac{1}{|W_R[\chi_k^{(1)}, \chi_k^{(1)*}]|}. \quad (\text{A.6})$$

В (A.6) использовано равенство $W_R[\chi_k^{(1)}, \chi_k^{(2)}] = W_0[\chi_k^{(1)}, \chi_k^{(2)}]$, которое является частным случаем весьма

полезного тождества

$$(k^2 - k'^2) \int_0^R \chi_k \chi_{k'} dr = W_R[\chi_k, \chi_{k'}] - W_0[\chi_k, \chi_{k'}]. \quad (\text{A.7})$$

Полагая $k' = k^*$, получаем

$$(k^2 - k^{*2}) \int_0^R |\chi_k|^2 dr = W_R[\chi_k, \chi_k^*] - W_0[\chi_k, \chi_k^*], \quad (\text{A.8})$$

откуда при $\text{Im } k^2 > 0$

$$\rho_k(R) = \frac{1}{2 \text{Im } k^2} \frac{1}{\int_0^R |\chi_k^{(1)}(r)|^2 dr}. \quad (\text{A.9})$$

Таким образом, радиус окружности C_R , в зависимости от того, бесконечна или конечна величина $\int_0^R |\chi_k^{(1)}(r)|^2 dr$, стремится или к нулю или к постоянной величине. Покажем теперь, что если $R > R'$, то C_R находится внутри $C_{R'}$, т. е. что не только радиус окружности C_R , но и сама окружность стремится к определенной окружности (или точке) при $R \rightarrow \infty$. Покажем сначала, что при $\text{Im } k^2 > 0$ верхней полуплоскости величины κ соответствует внешность окружности C_R . Для этого найдем мнимую часть величины κ , соответствующей $m_k(R) = \infty$:

$$\begin{aligned} \text{Im } \kappa &= -\text{Im} \left(\frac{\chi_k^{(1)'}(R)}{\chi_k^{(1)}(R)} \right) = \frac{1}{2 |\chi_k^{(1)}(R)|^2} \text{Im } W_R[\chi_k^{(1)}, \chi_k^{(1)*}] = \\ &= \frac{\text{Im } k^2}{|\chi_k^{(1)}(R)|^2} \int_0^R |\chi_k^{(1)}(r)|^2 dr. \quad (\text{A.10}) \end{aligned}$$

Таким образом, при $\text{Im } k^2 > 0$ верхняя полуплоскость κ переходит во внешность окружности C_R . Рассмотрим теперь решение (A.2) с произвольным m , лежащим внутри

или на C_R . В этом случае

$$\operatorname{Im} \kappa = -\operatorname{Im} \left(\frac{\chi'_k}{\chi_k} \right) = \frac{\operatorname{Im} W_R [\chi_k, \chi_k^*]}{2 |\chi_k(R)|^2} \leq 0,$$

$$\operatorname{Im} W_R [\chi_k, \chi_k^*] = \left\{ \operatorname{Im} W_0 [\chi_k, \chi_k^*] + 2 \operatorname{Im} k^2 \int_0^R |\chi_k|^2 dr \right\} \leq 0,$$

откуда

$$\begin{aligned} \int_0^R |\chi_k|^2 dr &= \int_0^R |m_k \chi_k^{(1)} + \chi_k^{(2)}|^2 dr \leq \\ &\leq -\frac{\operatorname{Im} W_0 [\chi_k, \chi_k^*]}{2 \operatorname{Im} k^2} = \frac{\operatorname{Im} m_k}{\operatorname{Im} k^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Пусть $R' < R$. Тогда

$$\int_0^{R'} |\chi_k|^2 dr < \int_0^R |\chi_k|^2 dr \leq \frac{\operatorname{Im} m_k}{\operatorname{Im} k^2}, \quad (\text{A.12})$$

т. е. точка m_k лежит также внутри окружности $C_{R'}$.

Таким образом, окружность C_R при $R > R'$ находится внутри окружности $C_{R'}$. Следовательно, при $R \rightarrow \infty$ окружности C_R стремятся либо к предельной окружности, либо к предельной точке. Если $m = m_k$ — предельная точка или некоторая точка предельной окружности, то

$$\int_0^{\infty} |m_k \chi_k^{(1)} + \chi_k^{(2)}|^2 dr \leq \frac{\operatorname{Im} m_k}{\operatorname{Im} k^2}, \quad (\text{A.13})$$

откуда следует, что при $\operatorname{Im} k^2 \neq 0$ существует квадратично интегрируемое решение уравнения (1.6) гл. I

$$\chi_k(r) = m_k(\infty) \chi_k^{(1)}(r) + \chi_k^{(2)}(r).$$

Поскольку в случае предельной точки $\int_0^{\infty} |\chi_k^{(1)}(r)|^2 dr = \infty$, то в этом случае $\chi_k(r)$ с точностью до нормировки является единственным квадратично интегрируемым решением.

В случае предельного круга как $\chi_k(r)$, так и $\chi_k^{(1)}(r)$ квадратично интегрируемы, и потому любое решение уравнения (1.6) гл. I будет квадратично интегрируемым.

Таким образом, если на волновую функцию наложить лишь одно условие квадратичной интегрируемости, не обращая внимания на граничное условие в нуле, то при $\operatorname{Im} E \neq 0$ в случае предельной точки существует одна такая линейно независимая функция, соответственно в случае предельного круга — две линейно независимые функции. Таким образом, показано, что существуют квадратично интегрируемые функции, соответствующие комплексным собственным значениям, а это означает, что нарушается известное свойство самосопряженности. Математики говорят (см., например, книгу Н. И. Ахиезера и И. М. Глазмана, 1966), что в первом случае оператор $-\frac{d^2}{dr^2} + V(r)$ на интервале $(0, \infty)$ обладает индексами дефекта (1.1), во втором случае — индексами дефекта (2.2) (здесь первое число определяет число линейно независимых квадратично интегрируемых собственных функций при $\operatorname{Im} E > 0$, второе — при $\operatorname{Im} E < 0$).

Нетрудно видеть, однако, что два решения χ_k и $\chi_{k'}$ с различными k и k' , вообще говоря, не ортогональны друг другу. Действительно, умножая (1.6) на $\chi_{k'}^*$, вычитая уравнение для $\chi_{k'}^*$, умноженное на χ_k , и интегрируя по r от 0 до ∞ , получаем

$$(k^2 - k'^2) \int_0^{\infty} \chi_{k'}^* \chi_k dr = \chi_{k'}^*(0) \chi_k(0) \left(\frac{\chi'_k(0)}{\chi_k(0)} - \frac{\chi_{k'}^*(0)}{\chi_{k'}^*(0)} \right).$$

Отсюда видно, что для ортогональности решений необходимо, чтобы $\chi'_k(0)/\chi_k(0) = -\kappa$ являлась действительной величиной, не зависящей от k .

Таким образом, хотя оператор $-\frac{d^2}{dr^2} + V(r)$ на интервале $(0, \infty)$ и является формально эрмитовым (самосопряженным), для того чтобы сделать его самосопряженным по существу (или, как говорят математики, расширить его до самосопряженного оператора (Н. И. Ахиезер, И. М. Глазман, 1966)), на волновые функции

необходимо наложить действительное граничное условие в нуле: $\chi'(0)/\chi(0) = -\kappa$. Оператор $-\frac{d^2}{dr^2} + V(r)$, определенный на таком классе функций, уже обладает известными свойствами эрмитового оператора: в частности, все его собственные значения действительны, а собственные функции, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны друг другу. Рассмотренный здесь случай является одним из простейших: в этом случае самосопряженное расширение оператора определяется действительным числом κ . При этом спектр энергий и вид волновых функций существенным образом зависят от κ .

Величина κ в свою очередь определяется физической постановкой задачи. Так, например, во многих задачах из физических соображений следует считать $\chi(0) = 0$, что соответствует выбору расширения $\kappa = \infty$. При этом условии наш оператор оказывается самосопряженным в случае предельной точки. В случае же предельного круга, для того чтобы сделать его самосопряженным, необходимо наложить еще граничное условие на бесконечности.

Если оператор задан на интервале $(-\infty, +\infty)$ (или же если точка $r = 0$ является сингулярной), то его индексы дефекта (m, m) связаны с индексами дефекта на интервале $(-\infty, 0)$ и индексами дефекта на интервале $(0, +\infty)$ простой формулой $m = m_- + m_+ - 2$ (или $m = m_0 + m_+ - 2$) (Н. И. Ахиезер и И. М. Глазман, 1966).

Следует подчеркнуть, что условие самосопряженности некоторых операторов, например гамильтониана H имеет важный физический смысл (подробное обсуждение этого вопроса с рассмотрением ряда примеров можно найти в книге А. Вайтмана (1964)). Мы отметим здесь лишь тот факт, что это условие запрещает существование сферических функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ с полуцелыми значениями l и m (В. Паули, 1939; К. ван Винтер, 1968). Следует иметь в виду, что во многих случаях, особенно в квантовой теории поля, приходится иметь дело со значительно более сложными операторами и решение вопроса об их самосопряженности является далеко нетривиальной задачей (А. Вайтман, 1964).

Возвращаясь к случаю предельной точки, заметим, что величину m_k можно найти по формуле

$$m_k(\infty) = - \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\chi_k^{(2)}(R)}{\chi_k^{(1)}(R)}. \quad (\text{A.14})$$

Эта предельная функция будет, по-прежнему, аналитической функцией k^2 при $\text{Im } k^2 \neq 0$; при $\text{Im } k^2 = 0$ она может иметь уже не только полюса, но, например, и точки ветвления, которые могут получаться из полюсов путем предельного перехода. Полюса функции m_k дают собственные значения уравнения (1.6) гл. I с граничным условием $\chi_k(0) = 0$, причем, если в окрестности полюса

$$m_k \sim \frac{r_n^2}{k_n^2 - k^2}, \quad \text{то соответствующая нормированная волновая функция равна } r_n \chi_{k_n}^{(1)}(r). \quad \text{Точки } k_0, \text{ которые не являются полюсами } m_k, \text{ но в которых } \lim_{k^2 \rightarrow k_0^2 + i\varepsilon} \text{Im } m_k \neq 0$$

определяют непрерывный спектр уравнения (1.6) гл. I.

Мы рассмотрели случай простейшего граничного условия в нуле. Общий случай разобран в книгах Э. Титчмарша (1946), Б. М. Левитана (1950), Э. Коддингтона и Н. Левинсона (1955).

Приведем здесь без доказательства разложение произвольной квадратично интегрируемой волновой функции $f(r)$ с $f(0) = 0$ по собственным функциям $\chi_k^{(1)}(r)$ оператора $-\frac{d^2}{dr^2} + V(r)$, удовлетворяющим тому же граничному условию. Определим коэффициенты разложения f_k по обычной формуле

$$f_k = \int_0^\infty f(r) \chi_k^{(1)*}(r) dr. \quad (\text{A.15})$$

Оказывается, что тогда

$$f(r) = \int f_k \chi_k^{(1)}(r) d\rho_k, \quad (\text{A.16})$$

где

$$\frac{d\rho_k}{dk^2} \Big|_{k^2=k_0^2} = \frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \text{Im } m_k, \quad k^2 = k_0^2 + i\varepsilon, \quad \varepsilon > 0. \quad (\text{A.17})$$

Условие полноты для такой системы функций имеет вид

$$\int_0^\infty |f(r)|^2 dr = \int |f_k|^2 d\rho_k. \quad (\text{A.18})$$

Итак, зная функцию m_k , можно полностью решить вопрос о нахождении системы собственных функций и о разложении произвольной квадратично интегрируемой функции по этой системе.

Разложение в случае предельного круга имеет более сложный вид. Детальное рассмотрение этого случая содержится в упомянутых выше книгах.

Перейдем к рассмотрению вопросов, касающихся характера спектра уравнения Шредингера. Обычно считают, что если частица может уходить на бесконечность, т. е. если $E > U(r)$ при $r \rightarrow \infty$, то волновая функция частицы принадлежит непрерывному спектру и не является квадратично интегрируемой. Это утверждение, однако, верно не всегда, что впервые было замечено Е. Вигнером и И. фон Нейманом (1929). Приведем их пример.

Из уравнения (1.6) гл. I нетрудно выразить потенциал через волновую функцию, соответствующую данной энергии E_0 :

$$(V - k_0^2) = \frac{\chi''}{\chi} = \left[\left(\frac{\chi'}{\chi} \right)' + \left(\frac{\chi'}{\chi} \right)^2 \right]. \quad (\text{A.19})$$

Выберем начало отсчета энергии и масштаб длины так, что $E_0 = 0$, а r является безразмерной величиной. Волновую функцию χ возьмем в виде $\chi = Cr^{-\alpha} \sin r^\beta$. Тогда для сходимости нормировочного интеграла

$$\int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr \sim \int_0^\infty r^{-2\alpha} \sin^2 r^\beta dr$$

необходимо выполнение неравенств

$$2\beta > 2\alpha - 1 > 0. \quad (\text{A.20})$$

Подставляя выражение для χ в формулу (A.19), получаем

$$V = \left[\frac{\alpha(\alpha+1)}{r^2} - \beta^2 r^{2(\beta-1)} + \beta(\beta-2\alpha-1)r^{\beta-2} \text{ctg } r^\beta \right]. \quad (\text{A.21})$$

Откуда видно, что для того, чтобы потенциал $V(r)$ не обладал сингулярностями при $r \neq 0$, необходимо выполнение условия

$$\beta = 2\alpha + 1; \quad (\text{A.22})$$

после чего условие сходимости нормировочного интеграла принимает вид $\alpha > \frac{1}{2}$.

После введения величины $\nu = 4\alpha$ приходим к следующим выражениям для потенциала и волновой функции

$$V = \left[\frac{\nu(\nu+4)}{16r^2} - \frac{(\nu+2)^2}{4} r^\nu \right], \quad \nu > 2, \quad (\text{A.23})$$

$$\chi = Cr \frac{\nu}{4} \sin r \frac{\nu+2}{2}. \quad (\text{A.24})$$

Итак, получено квадратично интегрируемое решение уравнения Шредингера для того случая, когда частица может уходить на бесконечность*). Следует, однако, отметить, что потенциалы такого типа слишком быстро стремятся к $-\infty$ при $r \rightarrow \infty$ и при рассмотрении обычных задач квантовой механики не встречаются.

Посмотрим теперь, чему соответствует такое решение в классической механике. Из закона сохранения энергии при $r \rightarrow \infty$ находим

$$dt = \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{m}(E-U)}} \sim \frac{dr}{\sqrt{-\frac{2}{m}U}} = \frac{dr}{\frac{\hbar}{m} \frac{\nu+2}{2} r^{\nu/2}}. \quad (\text{A.25})$$

Таким образом, в случае $\nu > 2$ время, необходимое для ухода частицы из точки r_0 на бесконечность, оказывается

*) Волновая функция (A.24) имеет бесконечное число нулей; в соответствии с этим имеется бесконечное число аналогичных функций с $E < E_0 = 0$.

конечным и при $r_0 \rightarrow \infty$ равно

$$t_0 \sim \frac{r_0^{-\left(\frac{\nu}{2}-1\right)}}{\frac{\hbar}{m} \left(\frac{\nu^2}{4}-1\right)}. \quad (\text{A.26})$$

Вспоминая, что в квазиклассическом приближении вероятность найти частицу на интервале dr , равная $|\chi|^2 dr$, пропорциональна промежутку времени dt , мы приходим к формуле $|\chi|^2 \sim r^{-\nu/2}$, согласующейся с (A.24), усредненной по осцилляциям. Таким образом, квадратичной интегрируемости волновой функции в квантовой механике соответствует конечность времени ухода частицы на бесконечность в классической механике. Иными словами, стационарное решение χ при $\nu > 2$ описывает колебания частицы в бесконечной области.

Мы нашли пока одно квадратично интегрируемое решение уравнения (1.6), соответствующее энергии $E_0 = 0$. Для выяснения характера спектра оператора $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r)$ рассмотрим сначала это уравнение на отрезке $(0, R)$. Обозначим через χ_k решение нашего уравнения, удовлетворяющее граничному условию: при $r \rightarrow 0$ $\chi_k(r) \sim r^{1+\nu/4}$ (второе решение мы можем не рассматривать, поскольку оно сингулярно: при $r \rightarrow 0$ $\chi_k \sim r^{-\nu/4}$). Потребуем, чтобы две такие функции χ_k и $\chi_{k'}$, соответствующие различным значениям энергии E и E' , были бы ортогональны друг другу на отрезке $(0, R)$. Для этого необходимо, чтобы при $r = R$ они удовлетворяли одному и тому же граничному условию: $\chi'_k(R) + \kappa \chi_k(R) = 0$. Это граничное условие может выполняться лишь при некоторых фиксированных значениях $k = k_n(\kappa, R)$, т. е. спектр в этом случае дискретен. Устремляя R к бесконечности, находим спектр нашей задачи, который при этом остается дискретным*). В самом деле, при $r \rightarrow \infty$ асимптотика волновой функции $\chi_k(R)$ имеет вид

$$\chi_k(r) \sim C_{kr} \frac{\nu}{4} \sin\left(r \frac{\nu+2}{2} + \gamma(k)\right), \quad (\text{A.27})$$

*) Следует подчеркнуть то обстоятельство, что хотя квадратично интегрируемое решение существует при любой энергии, спектр определяется условием ортогональности и остается дискретным.

откуда видно, что два таких решения будут ортогональными, если $\gamma(k) = \gamma(k') = \gamma$. Итак в нашем случае как спектр энергий, так и вид соответствующих волновых функций определяется одним числом — фазой γ волновой функции $\chi_k(r)$ при $r \rightarrow \infty$. Таким образом, рассмотрен-

ный нами оператор $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r)$ не является в данном случае самосопряженным и становится таковым лишь при наложении некоторого условия на асимптотическое поведение волновых функций на бесконечности. Математики говорят, что величина γ определяет самосопряженное расширение оператора H .

Приведем еще одно соображение, показывающее, что спектр оператора H в данном случае дискретен. Пусть все функции χ_k , $\chi_{k'}$ нормированы на единицу. Обозначим через $N(k, k')$ величину $\int \chi_k \chi_{k'} dr$. Очевидно, что $N(k, k) = 1$. В силу непрерывности функции N при k' , достаточно близких к k , $N(k, k') \neq 0$, т. е. состояния χ_k и $\chi_{k'}$ не ортогональны друг другу.

Мы рассмотрели случай потенциала, имеющего сингулярность при $r \rightarrow \infty$. Аналогичная ситуация имеет место для потенциалов, которые как на $+\infty$, так и на $-\infty$ стремятся к $-\infty$ быстрее, чем x^2 . Простейшим примером такого потенциала является $U(x) = -\alpha x^4$. Отличие от предыдущего случая заключается лишь в том, что здесь для самосопряженности задачи нужно требовать определенного асимптотического поведения волновой функции как на $-\infty$, так и на $+\infty$. При этом спектр энергий и вид волновых функций определяется уже двумя числами γ_- и γ_+ .

Хотя такие потенциалы и не встречаются в физике, но, например, потенциал $-\alpha x^2$ возникает как эффективный потенциал в задаче о квантовом осцилляторе с переменной частотой (А. М. Переломов, В. С. Попов, 1969). Могут ли возникать в нестационарных задачах другие эффективные потенциалы такого вида — интересный вопрос, ответ на который в настоящее время неизвестен.

В противоположном случае, когда $U(x) \rightarrow +\infty$ при $|x| \rightarrow \infty$, мы имеем дело с одним лишь дискретным спектром. Необходимое и достаточное условие существования

одного лишь дискретного спектра для потенциалов, ограниченных снизу, было найдено А. М. Молчановым (1953) и заключается в том, что после усреднения потенциала $U(x)$ по любому сколь угодно малому, но фиксированному промежутку ε усредненный потенциал

$$\bar{U}_\varepsilon(x) = \frac{1}{\varepsilon} \int_x^{x+\varepsilon} U(x') dx' \quad (\text{A.28})$$

стремится к бесконечности при $|x| \rightarrow \infty$ при всех значениях ε .

До сих пор мы имели дело с потенциалами, не слишком сингулярными в нуле $\int_0^a U(r)r dr < \infty$. Рассмотрим

простейший случай потенциала притяжения, сингулярного в начале координат (К. Кейс, 1950):

$$U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta}{r^2}, \quad \chi'' + \frac{\beta}{r^2} \chi = \kappa^2 \chi, \quad E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2, \quad \beta > 0. \quad (\text{A.29})$$

Выбираем решение, экспоненциально затухающее при $r \rightarrow +\infty$, $\chi \sim e^{-\kappa r}$ при $r \rightarrow \infty$. При $r \rightarrow 0$ это решение имеет вид $\chi \sim C_1 r^{\beta_1} + C_2 r^{\beta_2}$, где $\beta_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \beta}$.

Если $\beta < 1/4$, то имеет место обычный случай, т. е. оба члена имеют различный порядок величины при $r \rightarrow 0$. Рассматривая потенциал (A.29) как предельный случай обрезанного потенциала, нетрудно показать, что мы должны оставить лишь первый член в χ (см. книгу Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963)). При $\beta > 1/4$ оба члена в выражении для χ имеют одинаковый порядок малости, и потому ни одним из них нельзя пренебречь. В силу действительности решения коэффициенты C_1 и C_2 являются комплексно сопряженными друг другу и

$\chi_E \sim C_E r^{1/2} \cos\left(\sqrt{\beta - \frac{1}{4}} \ln r + \gamma(E)\right)$. Как и в предыдущем случае, для самосопряженности задачи необходимо наложить условие $\gamma(E) = \gamma$ на асимптотическое поведение волновых функций при $r \rightarrow 0$, откуда видно, что

спектр зависит от одного параметра γ и является дискретным. В данном случае найти этот спектр нетрудно. Заметим, что оператор $H = -\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\beta}{r^2}\right)$ является однородным оператором степени -2 . Поэтому если функция $\chi(r)$ является нормированным решением нашего уравнения, соответствующим энергии E , то функция $\sqrt{\alpha} \chi(\alpha r)$ также является нормированным решением уравнения, соответствующим, однако, энергии $\alpha^2 E$. Для того чтобы асимптотическое поведение при $r \rightarrow 0$ осталось тем же самым, необходимо, чтобы $\sqrt{\beta - \frac{1}{4}} \ln \alpha_n = \pi n$, откуда

$$\alpha_n = e^{\frac{\pi n}{\sqrt{\beta - \frac{1}{4}}}}, \quad E_n = E_0 e^{\frac{2\pi n}{\sqrt{\beta - \frac{1}{4}}}}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{A.30})$$

Аналогичная ситуация имеет место в случае потенциала $V(r) = \frac{-\beta}{r^s}$, $s > 2$. Волновые функции в этом случае нетрудно найти с помощью квазиклассического приближения. При $r \rightarrow 0$ они имеют вид

$$\chi \sim Cr^{s/4} \cos\left[\frac{2}{s-2} \left(\frac{\beta}{r^{s-2}}\right)^{1/2} + \gamma\right], \quad (\text{A.31})$$

и опять условие ортогональности волновых функций требует, чтобы фаза γ у всех χ была одинаковой.

Следует отметить, что иногда физически более приемлемым является условие полного поглощения в начале координат (Е. Фогт, Г. Ванье, 1954; С. П. Аллилуев, 1971). Это условие соответствует выбору $\gamma = i\infty$. Оба случая (γ действительно и $\gamma = i\infty$) являются предельными случаями общего граничного условия при $r = 0$, когда γ комплексно, $\gamma = \gamma_1 + i\gamma_2$, $\gamma_2 > 0$, что приводит к частичному поглощению в нуле (А. М. Переломов, В. С. Попов, 1970 Б).

Подчеркнем следующее принципиальное различие между сингулярными и несингулярными потенциалами. В случае несингулярных потенциалов (самосопряженная задача) квадратично интегрируемые решения уравнения Шредингера образуют полный ортогональный набор

функций. В «сингулярном» случае мы имеем дело со сверхполным набором состояний. Для получения полного набора состояний необходимо фиксировать фазу, т. е. асимптотическое поведение волновых функций вблизи сингулярной точки (или, как говорят математики, расширить оператор до самосопряженного).

Физическое различие между этими двумя случаями заключается в следующем (К. Кейс, 1950). Если в физической проблеме потенциал взаимодействия становится бесконечным при $r = 0$ (как, например, в случае кулоновского взаимодействия, где $V(r) = -\alpha/r$), то мы имеем дело с идеализацией. В случае кулоновского взаимодействия учет конечных размеров ядра изменяет поведение потенциала на малых расстояниях. Важно здесь то, что если закон справедлив вплоть до достаточно малых расстояний, то собственные функции и собственные значения по существу не зависят от того, как видоизменяется потенциал на малых расстояниях. Для потенциалов с сингулярностью $1/r^2$ или обладающих более сильной сингулярностью это уже не так. В этом случае собственные функции и собственные значения существенно зависят от вида обрезания. Из рассмотренного выше примера видно, однако, что для описания того, что происходит на малых расстояниях, достаточно ввести один параметр γ .

Заметим здесь также, что временная функция Грина $G = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$, определяющая динамику развития процесса, зависит от величины фазы γ : $G = G_\gamma$, т. е. динамика развития системы не определена однозначно оператором H (А. Вайтман, 1964).

Характерной особенностью сингулярных потенциалов притяжения является отсутствие основного состояния системы ($E_n \rightarrow -\infty$), что неприемлемо из физических соображений. Обрезание потенциала на малых расстояниях устраняет этот недостаток: появляется основное состояние, энергия которого E_0 конечна. При этом E_0 существенно зависит от радиуса обрезания r_0 ($E_0 \rightarrow -\infty$ при $r_0 \rightarrow 0$). Если r_0 — малая величина, то в потенциале $V(r)$ имеется большое число уровней и для n -го состояния $n \gg 1$ и $|E_n| \ll |E_0|$ введение обрезания эквивалентно указанному выше выбору константы γ .

Рассмотрение такого рода случаев необходимо также для того, чтобы понять, какая ситуация может иметь место в более сложных случаях, например в релятивистском случае и особенно в случае квантовой теории поля (К. Кейс, 1950; А. Вайтман, 1964).

Нерелятивистские задачи с сингулярными потенциалами могут также рассматриваться как упрощенные модели так называемых неперенормируемых теорий поля (Н. Хури, А. Пайс, 1964; А. Пайс, Т. Ву, 1964; Б. А. Арбузов, А. Т. Филиппов, 1964).

Рассмотрим еще одно несколько необычное явление, замеченное впервые Е. Вигнером и И. фон Нейманом (1929). Оказывается, что в случае непрерывного спектра при определенных значениях энергии могут существовать квадратично интегрируемые волновые функции.

Пусть, как и в рассмотренном выше случае, $E_0 = 0$ и r является безразмерной переменной. Потенциал $V(r)$ может быть найден при этом по формуле (А.19). Возьмем $\chi(r)$ в виде $\chi(r) = f(r) \sin r$, причем мы можем выбрать $f(r)$ так, чтобы функция $\chi(r)$ была квадратично интегрируема. Для потенциала $V(r)$ получаем следующее выражение:

$$V(r) = \left(-1 + 2 \operatorname{ctg} r \frac{f'}{f} + \frac{f''}{f} \right). \quad (\text{A.32})$$

Подставляя $f(r) = [a^2 + (2r - \sin 2r)^2]^{-1}$, находим *)

$$V = -1 - 32 \sin^4 r \frac{a^2 - 3(2r - \sin 2r)^2}{[a^2 + (2r - \sin 2r)^2]^2} - 16 \frac{(2r - \sin 2r) \sin 2r}{a^2 + (2r - \sin 2r)^2}. \quad (\text{A.33})$$

Из этого выражения видно, что при достаточно большом значении a второй и третий члены в нем становятся сколь угодно малыми величинами. Тем не менее их отбросить или же учесть по теории возмущений нельзя, поскольку именно за счет этих членов функция, принадлежащая непрерывному спектру и не являющаяся квадратично интегрируемой, превращается в функцию квадратично интегрируемую.

*) В (А.33) исправлена вычислительная ошибка авторов вышеуказанной работы.

Этот эффект возникает из-за того, что потенциал слишком медленно приближается к своему асимптотическому значению

$$V(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -1 - \frac{8 \sin 2r}{r}. \quad (\text{A.34})$$

Волновая функция при этом имеет вид

$$\chi \underset{r \rightarrow \infty}{(r)} \sim \frac{\sin r}{4r^2 \left(1 - \frac{\sin 2r}{2r}\right)^2}, \quad (\text{A.35})$$

откуда видно, что она квадратично интегрируема. Известно, что для квадратичной интегрируемости волновой функции необходимо, чтобы потенциал приближался к своему асимптотическому значению не быстрее чем $1/r$ (см., например, обзор Т. Като, 1967). Это условие не является, однако, достаточным. Так, например, потенциал с чисто кулоновским хвостом $V(r) \sim -1 - \frac{\alpha}{r}$, как известно, не приводит к квадратично интегрируемому решению. В качестве другого предельного случая мы рассмотрим потенциал $V_0(r) = -1 - \varepsilon \sin(2r + \alpha)$, который получается при замене в (A.34) медленно меняющейся функции $8/r$ на постоянную ε . Имея в виду аналогию с классической механикой, сделаем замену $r \rightarrow t$, $\chi \rightarrow \xi$, после чего приходим к уравнению $\frac{d^2 \xi}{dt^2} + \omega^2(t) \xi = 0$, $\omega^2(t) = 1 + \varepsilon \sin(2t + \alpha)$ для классического осциллятора с переменной частотой и граничным условием $\xi(0) = 0$. При этом поскольку аргумент, стоящий под знаком синуса, меняется с частотой, в два раза большей чем $\omega_0 = 1$, то имеет место параметрический резонанс (см., например, книгу Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшица, 1958). Поэтому, подобрав соответствующим образом фазу α , можно добиться экспоненциального затухания амплитуды колебаний $\xi(t)$. В нашем случае величина $\varepsilon = 8/t$ уже не является константой, а уменьшается с течением времени. Это приводит к другому закону ($\xi(t) \sim 1/t^2$) уменьшения ξ с течением времени. При этом затухает лишь состояние с $E_0 = 0$, поскольку лишь оно находится в резонансе.

Состояния с энергией, близкой к нулю, не находятся в резонансе $\omega_0^2 = E + 1 \neq 1$ и потому не затухают. Соответствующие волновые функции при этом не являются квадратично интегрируемыми. Это рассуждение, которое ни в коей мере не является доказательством, поясняет смысл полученного выше результата и роль осцилляций потенциала типа $\sin 2r$.

Отметим еще одну задачу с несколько необычным спектром — случай периодического потенциала $V(x+a) = V(x)$. В этом случае, как известно, спектр является непрерывным, но заполняет не всю полусось энергии, а отдельные энергетические зоны, разделенные промежутками.

Из рассмотренных нами примеров видно разнообразие спектра уравнения Шредингера. На практике, однако, особые случаи встречаются редко и характер спектра обычно бывает ясен с самого начала.

Б. Квазиклассические свойства высоковозбужденных уровней в кулоновском поле

Высоковозбужденные уровни ($n \gg 1$) электрона в кулоновском поле отвечают состояниям, в которых электрон почти все время находится вдали от ядра*). В этом смысле такие состояния подобны состояниям электрона в непрерывном спектре при малой положительной энергии. Поэтому естественно, что должным образом усредненные величины (при $n \rightarrow \infty$, $E \rightarrow 0$) не должны отличаться от соответствующих величин для непрерывного спектра вблизи порога, т. е. при $0 < E \ll E_c$, где $E_c = \frac{me^4 Z^2}{\hbar^2}$ — атомная единица энергии, Ze — заряд атомного остатка, в поле которого находится электрон.

Как известно, процессы, в которых в конечном состоянии получаются медленные электроны, движущиеся в кулоновском поле, отличаются тем, что соответствующие сечения стремятся к конечной, не равной нулю величине

* См. приложение II к работе И. Л. Бейгмана и др. (1968), написанное П. Парадоксовым. Некоторые свойства высоковозбужденных уровней в кулоновском поле рассмотрены в работе А. М. Переломова и др. (1966).

σ_0 у порога при $E \rightarrow +0^*$). Обращение в нуль фазового объема ($dN/dE \sim p \sim \sqrt{E}$ при $E \rightarrow 0$) компенсируется бесконечным нарастанием матричных элементов за счет деформации волновой функции кулоновским полем:

$$\frac{|\psi_p(0)|^2}{|\psi_p(\infty)|^2} = \frac{2\pi p_c}{p(1 - e^{-2\pi p_c/p})} \sim \frac{p_c}{p} \quad (\text{Б.1})$$

при $E \rightarrow 0$. Здесь $p_c = mZe^2/\hbar$ — характерный импульс электрона в атоме, p — импульс налетающего электрона.

Этот результат находится в точном соответствии с квазиклассикой. В самом деле, в этом приближении

$$\frac{|\psi_p(0)|^2}{|\psi_p(\infty)|^2} = \frac{p_\infty S_\infty}{p_0 S_0},$$

где p_∞, p_0 — импульсы классической частицы на бесконечности и вблизи начала координат; S_∞ и S_0 — соответствующие площади поперечного сечения силовой трубки (эти множители специфичны для трехмерного случая и учитывают дополнительную концентрацию частиц в начале координат).

Используя закон сохранения момента количества движения $b_0 p_0 = b_\infty p_\infty$, связь b_0 и b_∞ : $b_0 = \left(\frac{b_\infty p_\infty}{\hbar}\right)^2 a$ (здесь $a = \hbar^2/Zme^2$ — боровский радиус, b_0 и b_∞ — радиусы сечения силовой трубки вблизи начала координат и на бесконечности), получаемую из уравнения классической траектории, и то обстоятельство, что в силу соотношения неопределенности минимально возможное значение $b_\infty p_\infty \sim \hbar$, получаем

$$\frac{|\psi(0)|^2}{|\psi(\infty)|^2} = \frac{p_\infty b_\infty^2}{p_0 b_0^2} = \frac{b_\infty}{b_0} = \frac{\hbar^2}{b_\infty p_\infty} \frac{1}{p_\infty a} \sim \frac{\hbar}{ap_\infty} = \frac{p_c}{p_\infty},$$

что согласуется с формулой (Б.1).

*) Хорошо известно, что без кулоновского взаимодействия сечение фотоэффекта и других процессов образования медленных частиц стремится к нулю пропорционально их импульсу $p \sim \sqrt{E}$. Соответственно сечение захвата медленных частиц будет $\sim 1/p \sim 1/v$ при отсутствии кулоновского поля. В отличие от этого, в кулоновском поле сечение захвата медленных заряженных частиц $\sim 1/p^2$, т. е. обратно пропорционально энергии.

В силу отмеченного выше свойства высоковозбужденных уровней, величины, относящиеся к дискретному спектру при $-E_c \ll E < 0$, т. е. при $n \rightarrow \infty$, можно выразить через значения соответствующих величин при нулевой энергии:

$$\frac{1}{E_2 - E_1} \sum_{n=n_1}^{n_2} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \int \sigma_{nlm}(E) dE = \sigma|_{E=+0} = \sigma_0. \quad (\text{Б.2})$$

При этом учитывается, что в дискретном спектре сечения имеют вид δ -функций (без учета ширины уровней) или представляют очень узкие резонансные кривые (предполагается, что $n_1 \gg 1, n_2 \gg 1$).

Из формулы (Б.2) следует, что интеграл от сечения по энергии для каждого отдельного подуровня с фиксированными n, l, m в среднем пропорционален n^{-5} ; поскольку число подуровней с данным n равно n^2 , сумма от n_1 до n_2 содержит

$$\sim \int_{n_1}^{n_2} n^2 dn = \frac{n_2^3 - n_1^3}{3} \text{ членов, а } E_2 - E_1 = \frac{E_c}{2} \frac{n_2^2 - n_1^2}{n_2^2 n_1^2}.$$

Таким образом,

$$\int \sigma_{nlm} dE \approx \frac{\sigma_0}{n^5} \frac{E_c}{2}. \quad (\text{Б.3})$$

Формулы (Б.2), (Б.3) относятся к нескольким типам процессов.

1. Поглощение света атомом в основном состоянии. При этом полагаем $\hbar\omega = I + E$ (I — потенциал ионизации атома) и сравниваем фотоэффект $\hbar\omega > I, E > 0$ и возбуждение высоких уровней при $\hbar\omega_n = I - E_c/2n^2$.

2. Взаимодействие быстрого электрона с ионом с испусканием кванта. Если энергия электрона равна E_1 , то он может излучить квант $\hbar\omega = E_1 - E$, перейдя в состояние с меньшей энергией $E > 0$, так что $\hbar\omega < E_1$ (в случае тормозного излучения) или $\hbar\omega_n = E_1 + E_c/2n^2$ (при рекомбинации на n -й возбужденный уровень).

3. Безызлучательное взаимодействие электрона с положительным ионом, связанное с внутренним возбуждением иона. Пусть W — энергия возбуждения иона; тогда

при энергии электрона $E_1 = W + E$, $E > 0$ происходит неупругое рассеяние электрона с уходом медленного электрона (с энергией E) на бесконечность. При энергии же электрона $E_n = W - E_c/2n^2$ происходит образование атома в возбужденном состоянии с положительной энергией. В этом состоянии возбужден внутренний электрон, и к тому же на далекой орбите находится связанный налетевший электрон. Так, например, возможен процесс $\text{He}^+(1s) + e^- \rightarrow \text{He}(2p, nl)$, где $\text{He}^+(1s)$ — положительный ион гелия в состоянии $1s$, n весьма велико. Поскольку в этом процессе обязательно участвуют два электрона, такой процесс безызлучательного захвата электрона носит название диэлектронной рекомбинации.

Диэлектронная рекомбинация имеет важное значение в астрофизике (Д. Бейтс, 1962). С помощью формулы (Б.3) можно получить полезные оценки для вероятности этого процесса, поскольку нас интересуют в данном случае именно суммы по всем состояниям с высокими n . Подробное рассмотрение диэлектронной рекомбинации можно найти в статье И. Л. Бейгмана и др. (1968). Как выясняется при этом, оценки вероятности процесса, приведенные в работах А. Буржесса (1964, 1965), В. Тукера и Р. Гоулда (1966), сильно завышены.

Добавление при корректуре

Влияние барьера на состояния с малой энергией связи и на рассеяние медленных частиц. Как показано в работе А. Б. Мигдала, А. М. Переломова и В. С. Попова (1971), наличие барьера существенно меняет результаты §§ 2 и 3 гл. I. S -матрица имеет вид $S = S_1 \exp(2i\phi(k))$, где $S_1 = (k + i\lambda_1)(k + i\lambda_2)(k - i\lambda_1)^{-1}(k - i\lambda_2)^{-1}$. При наличии связанного уровня его энергия $\epsilon \sim -\lambda_1^2/2$, но у S имеется второй полюс λ_2 , соответствующий виртуальному состоянию. При плавном изменении глубины ямы уровень исчезает, однако есть промежуточная область, где λ_1 и λ_2 вещественны. (В случае кулоновского барьера проницаемость $\rightarrow 0$ при $\epsilon \rightarrow 0$, и эта область исчезает.) Лишь после «столкновения» $\lambda_1 = \lambda_2$ возникает квазистационарное состояние с комплексными $\lambda_2^* = \lambda_1$. В упомянутой статье рассмотрены также свойства волновых функций; частично для комплексных λ они исследованы также в работе В. М. Галицкого и В. Ф. Чельцова (1964).

ЛИТЕРАТУРА

- Агранович З. С., Марченко В. А. (1960), Обратная задача теории рассеяния, Харьков.
 Аллилуев С. П. (1957), ЖЭТФ 33, 200.
 Аллилуев С. П. (1971), ЖЭТФ 61, № 1.
 Арнольд В. И. (1967), Функциональный анализ и его приложения 1, 1.
 Ахиезер Н. И., Глазман И. М. (1966), Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве, «Наука».
 Базь А. И. (1957), ЖЭТФ 33, 923.
 Базь А. И., Окунь Л. Б. (1958), ЖЭТФ 35, 757.
 Базь А. И. (1959), ЖЭТФ 36, 1762.
 Базь А. И. (1961), ЖЭТФ 40, 1511.
 Базь А. И., Пузиков Л. Д., Смородинский Я. А. (1962), ЖЭТФ 42, 1249.
 Базь А. И. (1964), ЖЭТФ 47, 1874.
 Базь А. И. (1966), ЯФ 3, 658.
 Базь А. И., Демин В. Ф., Кузьмин И. И. (1966), ЯФ 4, 737.
 Базь А. И. (1967), ЯФ 5, 229.
 Бейгман И. Л., Вайнштейн Л. А., Сюняев Р. А. (1968), УФН 95, 267.
 Березин Ф. А., Фаддеев Л. Д. (1961), ДАН СССР 137, 1011.
 Березин Ф. А., Похил Г. П., Финкельберг В. М. (1964), Вестник МГУ № 1, 21.
 Березин Ф. А. (1965), Метод вторичного квантования, «Наука».
 Березин Ф. А. (1969), УМН 24, № 4, 65.
 Боголюбов Н. Н. (1947), Изв. АН СССР, сер. физ., 11, 77.
 Боголюбов Н. Н. (1958), ЖЭТФ 34, 58.
 Быков В. П., Вайнштейн Л. А. (1964), ЖЭТФ 47, 508.
 Быков В. П. (1965), Электроника больших мощностей, Сб. 4, стр. 66.
 Вайнштейн Л. А. (1965), Электроника больших мощностей, Сб. 4, 93.
 Виленкин Н. Я. (1965), Специальные функции и теория представлений групп, «Наука».
 Галицкий В. М., Чельцов В. Ф. (1964), Nucl. Phys. 56, 86.
 Гельфанд И. М., Левитан Б. М. (1951), Изв. АН СССР, сер. матем., 15, 309.
 Гельфанд И. М., Яглом А. М. (1956), УМН 11, № 1, 77.
 Гешкенбейн Б. В., Иоффе Б. Л. (1963), ЖЭТФ 44, 1211.

- Гольданский В. И. (1960), ЖЭТФ 39, 497.
 Гольданский В. И. (1965), УФН, 87, 255.
 Грибов В. Н., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. (1961) ЖЭТФ 40, 1190.
 Данилов Г. С. (1961), ЖЭТФ 40, 498.
 Делоне Г. А., Делоне Н. Б. (1968), ЖЭТФ 54, 1067.
 Демков Ю. Н. (1953), Вестник ЛГУ 11, 127.
 Демков Ю. Н. (1958), Вариационные принципы в теории столкновений, Физматгиз.
 Демков Ю. Н., Друкарев Г. Ф. (1964), ЖЭТФ 47, 918.
 Демков Ю. Н. (1965) ЖЭТФ 49, 885.
 Демков Ю. Н., Друкарев Г. Ф. (1965А), ЖЭТФ 49, 257.
 Демков Ю. Н., Друкарев Г. Ф. (1965Б), ЖЭТФ 49, 691.
 Демков Ю. Н., Комаров И. В. (1965), Вестник ЛГУ, № 10, 18.
 Друкарев Г. Ф. (1951), ЖЭТФ 21, 59.
 Дыхне А. М. (1960), ЖЭТФ 38, 570.
 Дьерди Г., Реван Я. (1965), ЖЭТФ 48, 1445.
 Зельдович Б. Я. (1965), Изв. вузов, Радиофизика 8, 522.
 Зельдович Я. Б. (1956), ЖЭТФ 31, 1101.
 Зельдович Я. Б. (1957А), ЖЭТФ 33, 1488.
 Зельдович Я. Б. (1957Б), ЖЭТФ 33, 1531.
 Зельдович Я. Б. (1959А), ЖЭТФ 36, 1952.
 Зельдович Я. Б. (1959Б), ФТТ 1, 1637.
 Зельдович Я. Б., Рабинович Е. М. (1959), ЖЭТФ 37, 1296.
 Зельдович Я. Б. (1960А), ЖЭТФ 38, 819.
 Зельдович Я. Б. (1960Б), ЖЭТФ 39, 776.
 Зельдович Я. Б. (1960В), ЖЭТФ 39, 1483.
 Зельдович Я. Б., Переломов А. М. (1960), ЖЭТФ 39, 1115.
 Зельдович Я. Б. (1961), ЖЭТФ 40, 1155.
 Зельдович Я. Б. (1966), ЖЭТФ 51, 1492.
 Зельдович Я. Б., Сахаров А. Д. (1966), ЯФ 4, 395.
 Иоффе Б. Л. (1957), ЖЭТФ 32, 1246.
 Капица П. Л. (1951), УФН, 44, 7.
 Келдыш Л. В. (1964), ЖЭТФ 47, 1945.
 Кобзарев И. Ю., Николаев Н. Н., Окунь Л. Б. (1969) ЯФ 10, 864.
 Котова Л. П., Переломов А. М., Попов В. С. (1968), ЖЭТФ 54, 1151.
 Крылов Н. С., Фок В. А. (1947), ЖЭТФ 17, 93.
 Ландау Л. Д., Смородинский Я. А. (1944), ЖЭТФ 14, 269.
 Ландау Л. Д., Померанчук И. Я. (1955), ДАН СССР 102, 489.
 Ландау Л. Д. (1957А), ЖЭТФ 32, 405.
 Ландау Л. Д. (1957Б), ЖЭТФ 32, 407.
 Ландау Л. Д. (1960), ЖЭТФ 39, 1856.
 Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1958), Механика, Физматгиз.
 Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1967), Теория поля, «Наука».
 Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1963), Квантовая механика, Физматгиз.
 Левитан Б. М. (1950), Разложение по собственным функциям, Гостехиздат, 1950.
 Лифшиц Е. М. (1939), ЖЭТФ 9, 237.

- Лось Ф. С. (1957), ЖЭТФ 33, 273.
 Марченко В. А. (1955), ДАН СССР 104, 695.
 Маслов В. П. (1965), Теория возмущений и асимптотические методы, Изд-во МГУ.
 Мейман Н. Н. (1963), ЖЭТФ 44, 1228.
 Мигдал А. Б., Крайнов В. П. (1966), Приближенные методы квантовой механики, «Наука».
 Мигдал А. Б., Переломов А. М., Попов В. С. (1971), ЯФ (в печати).
 Минлос Р. А., Фаддеев Л. Д. (1961А), ЖЭТФ 41, 1850.
 Минлос Р. А., Фаддеев Л. Д. (1961Б), ДАН СССР, 141, 1335.
 Молчанов А. М. (1953), Труды Моск. матем. об-ва 2, 169.
 Никишов А. И., Ритус В. И. (1966), ЖЭТФ 50, 255.
 Никишов А. И., Ритус В. И. (1967), ЖЭТФ 52, 223.
 Окунь Л. Б. (1966), УФН 89, 603.
 Парадоксов П. (1966), УФН 89, 707.
 Переломов А. М. (1962), ДАН СССР 146, 75.
 Переломов А. М., Попов В. С. (1966), ЖЭТФ 50, 179.
 Переломов А. М., Попов В. С., Терентьев М. В. (1966А), ЖЭТФ 50, 1393; (1966Б), ЖЭТФ 51, 309; (1966В), ЖЭТФ 51, 601.
 Переломов А. М., Попов В. С. (1967), ЖЭТФ 52, 514.
 Переломов А. М., Попов В. С. (1968), ЖЭТФ 54, 1799.
 Переломов А. М., Попов В. С., Кузнецов В. П. (1968), ЖЭТФ 54, 841.
 Переломов А. М., Попов В. С. (1969), ТМФ 1, 360.
 Переломов А. М., Попов В. С. (1970А), ТМФ 3, 377.
 Переломов А. М., Попов В. С. (1970Б), ТМФ 4, 48.
 Переломов А. М. (1971), ТМФ 6, 213.
 Попов В. С., Кузнецов В. П., Переломов А. М. (1967), ЖЭТФ 53, 331.
 Попов В. С., Переломов А. М. (1969А), ЖЭТФ 56, 1375.
 Попов В. С., Переломов А. М. (1969Б), ЖЭТФ 57, 1684.
 Ритус В. И. (1966), ЖЭТФ 51, 1544.
 Сердобольский В. И. (1959), ЖЭТФ 36, 1903.
 Скорняков Г. В., Тер-Мартirosян К. А. (1956), ЖЭТФ 31, 775.
 Скорняков Г. В. (1956), ЖЭТФ 31, 1046.
 Терентьев М. В. (1965), УФН 86, 231.
 Фаддеев Л. Д. (1958), ЖЭТФ 35, 433.
 Фаддеев Л. Д. (1959), УМН 14, № 4, 57.
 Фаддеев Л. Д. (1960), ЖЭТФ 39, 1459.
 Фаддеев Л. Д. (1963), Труды МИАН, т. 69.
 Фаддеев Л. Д. (1969), ТМФ 1, 1.
 Файн В. М. (1967), ЖЭТФ 52, 1544.
 Фирсов О. Б., Смирнов Б. М. (1964), ЖЭТФ 47, 232.
 Фок В. А. (1935), Изв. АН СССР, отд. мат. и ест. наук, № 2, 169.
 Халфин Л. А. (1956), ДАН СССР 111, 345.
 Халфин Л. А. (1957), ЖЭТФ 33, 1371.
 Шапиро Ф. Л. (1969), УФН 98, 732.
 Шноль Э. Э. (1970), ТМФ 4, 239.
 Якубовский О. Я. (1967), ЯФ 5, 1312.

- Amado R. D. (1961), *Phys. Rev.* **122**, 696.
 Arbusov B. A., Filippov A. T. (1964), *Phys. Lett.* **13**, 95.
 Baker H. F. (1905), *Proc. Lond. Math. Soc.* (2) **3**, 24.
 Baker G. A. (1956), *Phys. Rev.* **103**, 1119.
 Baker M. (1958), *Ann. Phys.* **4**, 27.
 Bander M., Itzykson C. (1966), *Rev. Mod. Phys.* **38**, 330, 346.
 Bardeen J., Cooper L. N., Schriffer J. R. (1957), *Phys. Rev.* **106**, 162.
 Bargmann V. (1935), *Zs. f. Phys.* **99**, 576.
 Bargmann V. (1949), *Rev. Mod. Phys.* **21**, 488.
 Bargmann V. (1952), *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **38**, 961.
 Bargmann V., Moshinsky M. (1960), *Nucl. Phys.* **18**, 697.
 Bargmann V., Moshinsky M. (1961), *Nucl. Phys.* **23**, 177.
 Bateman H., Erdelyi A. (1953A), *Higher Transcendental Functions*. v. 1, McGraw-Hill Book Co., N. Y.
 Bateman H., Erdelyi A. (1953B), *Higher Transcendental Functions* v. 2, McGraw-Hill Book Co., N. Y.
 Bates D. R., ed. (1962), *Atomic and molecular processes*, Acad. Press, N. Y.; *Атомные и молекулярные процессы*, «Мир», М., 1964.
 Bell J. S. (1962), *Nuovo Cim.* **24**, 452.
 Bell J. S., Goebel C. J. (1965), *Phys. Rev.* **138B**, 1198.
 Bertrand J. (1873), *Compt. Rend.* **77**, 849.
 Bethe H. A., Peierls R. E. (1935), *Proc. Roy. Soc.* **A148**, 146.
 Bethe H. A. (1937), *Rev. Mod. Phys.* **9**, 69; Г. Бете, *Физика ядра*, Гостехиздат, 1948.
 Bethe H. A., Salpeter E. E. (1957), *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*, Springer, Berlin; Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, 1960.
 Birkhoff G. D. (1927), *Dynamical systems*, N. Y.; Дж. Биркгоф, *Динамические системы*, Гостехиздат, 1941.
 Bjorken J. O., Goldberg A. (1960), *Nuovo Cim.* **16**, 92.
 Born M. (1925), *Vorlesungen über Atommechanik*, Springer, Berlin; М. Борн, *Лекции по атомной механике*, ОНТИ, 1934.
 Born M., Heisenberg W., Jordan P. (1925), *Zs. f. Phys.* **35**, 557.
 Bouten M., Maene N., van Leuven P. (1965), *Nuovo Cim.* **37**, 1119.
 Boyd G. D., Kogelnik H. (1962), *Bell System Techn. Journ.* **41**, 1347.
 Breit G., Wigner E. P. (1936), *Phys. Rev.* **49**, 519, 642.
 Breit G. (1947), *Phys. Rev.* **71**, 215.
 Breit G. (1957), *Phys. Rev.* **107**, 1612.
 Breit G. (1959), *Theory of Resonance Reactions and Allied Topics*, *Handb. d. Phys.* v. 41, Springer; Г. Брейт, *Теория резонансных ядерных реакций*, ИЛ, 1961.
 Brenig W., Haag R. (1959), *Fortschr. d. Phys.* **7**, 183.
 Brillouin L. (1926), *Compt. Rend.* **183**, 24.
 Brillouin L. (1933), *J. Phys. et Rad.* **4**, 1.
 Bruckner K. (1953), *Phys. Rev.* **89**, 834.
 Brussaard P. J., Tolhoek H. A. (1957), *Physica* **23**, 955.

- Burgess A. (1964), *Astrophys. J.* **139**, 776.
 Burgess A. (1965), *Astrophys. J.* **141**, 1588.
 Byers N., Yang C. N. (1961), *Phys. Rev. Lett.* **7**, 46.
 Calogero F. (1967), *Variable-phase approach to potential scattering*, N. Y.
 Carruthers P., Nieto M. M. (1968), *Rev. Mod. Phys.* **40**, 411.
 Case K. M. (1950), *Phys. Rev.* **80**, 797.
 Castillejo L., Dalitz R. H., Dyson F. J. (1956), *Phys. Rev.* **101**, 453.
 Chadan K. (1962), *Nuovo Cim.* **24**, 379.
 Chew G., Mandelstam S. (1960), *Phys. Rev.* **119**, 467.
 Christenson J. H., Cronin J. W., Fitch V. L., Turley R. (1964), *Phys. Rev. Lett.* **13**, 138.
 Chung V. (1965), *Phys. Rev.* **140**, B, 1110.
 Coddington E., Levinson N. (1955), *Theory of ordinary differential equations*, McGraw-Hill Book Co, N. Y.; Э. А. Коддингтон, Н. Левинсон, *Теория обыкновенных дифференциальных уравнений*, ИЛ, 1958.
 Cohen B. L. (1965), *Amer. J. Phys.* **33**, 97.
 Cooper L. N. (1956), *Phys. Rev.* **104**, 1189.
 Coulson C. L. A. (1952), *Valence*, Oxford University Press; Ч. Коульсон, *Валентность*, «Мир», 1965.
 Dashen F., Frautschi S. (1964), *Phys. Rev.* **135B**, 1190.
 De Alfaro V., Regge T. (1965), *Potential scattering*, North Holland Publ. Co.; де Альфаро В., Редже Т., *Потенциальное рассеяние*, «Мир», 1966.
 Dicke R. (1954), *Phys. Rev.* **93**, 99.
 Dirac P. A. M. (1930), *The principles of quantum mechanics*; П. А. М. Дирак, *Принципы квантовой механики*, ИЛ, 1960.
 Dyson F. J. (1964), *Sci. Amer.* **211**, 129.
 Ebel M. (1962), *J. Math. Phys.* **3**, 68.
 Eckart C. (1930), *Phys. Rev.* **35**, 1303.
 Ehrenfest P. (1920), *Ann. der Phys.* **61**, 5.
 Eisenhart L. P. (1934), *Phys. Rev.* **45**, 428.
 Eisenhart L. P. (1948), *Phys. Rev.* **74**, 87.
 Ekstein H. (1956), *Phys. Rev.* **101**, 830.
 Elliott J., Lein A. (1957), *Handbuch der Physik*, v. 39, Springer; Дж. Эллиот и А. Лейн, *Строение атомного ядра*, ИЛ, 1959.
 Elliott J. (1958), *Proc. Roy. Soc.* **A245**, 128, 562.
 Epstein J., Epstein S. (1962), *Amer. J. Phys.* **30**, 266.
 Eyring H., Walter J., Kimball G. E. (1946), *Quantum chemistry*; Эйринг Г., Уолтер Дж., Кимбалл Дж., *Квантовая химия*, ИЛ, М., 1948.
 Faxen H., Holtmark J. (1927), *Zs. f. Phys.* **45**, 307.
 Feenberg E. (1932), *Phys. Rev.* **40**, 40.
 Feenberg E. (1958), *Ann. Phys.* **3**, 292.
 Fermi E. (1936), *Ric. Sci.* **7**, 13.
 Feynman R. P. (1948) *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367; Сб. «Вопросы причинности в квантовой механике», ИЛ (1955), стр. 167.
 Feynman R. P. (1950), *Phys. Rev.* **80**, 440.
 Feynman R. P. (1951), *Phys. Rev.* **84**, 108.

- Feynman R. P. (1955), Progress in low temperature physics, v. 1, 17.
- Feynman R. P., Hibbs A. R. (1965), Quantum mechanics and path integrals, N. Y.; Р. Фейнман, А. Хиббс, Квантовая механика и интегралы по траекториям, «Мир», 1968.
- Fock V. A. (1930), Zs. f. Phys. **63**, 855.
- Fock V. A. (1935), Zs. f. Phys. **98**, 145.
- Fowler M. (1961), Ann. Phys. **16**, 26.
- Frautschi S. (1963), Regge poles and S-matrix theory, Benjamin, N. Y.
- Froissart M., Goldberger M. L., Watson K. M. (1963), Phys. Rev. **131**, 2820.
- Gamow G. A. (1928), Zs. f. Phys. **51**, 204; **52**, 510.
- Garwin R., Lederman L., Weinrich W. (1957), Phys. Rev. **105**, 1415.
- Gell-Mann M. (1962), Phys. Rev. **125**, 1067.
- Gerjuoy E. (1965), J. Math. Phys. **6**, 993, 1396.
- Glauber R. J. (1963), Phys. Rev. **131**, 2766 (1963).
- Goldberger M. L., Watson K. M. (1962), Phys. Rev. **127**, 2284.
- Goldberger M. L., Lewis H. W., Watson K. M. (1963), Phys. Rev. **132**, 2764.
- Goldberger M. L., Watson K. M. (1964), Collision theory J. Wiley, N. Y.; М. Гольдбергер, К. Ватсон, Теория столкновений, «Мир», 1966.
- Goldberger M. L., Watson K. M. (1964A), Phys. Rev. **134B**, 919.
- Goldberger M. L., Watson K. M. (1964B), Phys. Rev. **137B**, 1396.
- Golden S. (1957), Phys. Rev. **105**, 604.
- Gordon W. (1928), Zs. f. Phys. **48**, 180.
- Gurney R. W., Condon E. U. (1929), Phys. Rev. **33**, 127.
- Hammermesh M. (1962), Group theory and its application to physical problems; М. Хаммермеш, Теория групп и ее применение к физическим проблемам, «Мир», 1966.
- Hartman Th. (1962), J. Appl. Phys. **33**, 3427.
- Hausdorff F. (1906), Berichte Saechsichen Akad. Wiss. (Math. Phys. Kl.), **58**, 19.
- Heading J. (1962), An introduction to phase-integral methods Methuen, N. Y.; Дж. Хединг, Введение в метод фазового интеграла (метод ВКБ), «Мир», 1965.
- Heisenberg W. (1943), Zs. f. Phys. **120**, 513, 673.
- Heisenberg W. (1946), Zs. f. Naturforsch. **1**, 608.
- Hirschfelder J. O. (1960), J. Chem. Phys. **33**, 1762.
- Hostler L., Pratt R. (1963), Phys. Rev. Lett. **10**, 469.
- Hostler L. (1964), J. Math. Phys. **5**, 591.
- Hu N. (1948), Phys. Rev. **74**, 131.
- Hülthen L. (1933), Zs. f. Phys. **86**, 21.
- Humblet J. (1952), Mem. Soc. Roy. Sci. Liege **4**, 12.
- Husimi K. (1953), Prog. Theor. Phys. **9**, 381.
- Ida M. (1959), Prog. Theor. Phys. **21**, 625.

- Ida M. (1963), Prog. Theor. Phys. **34**, 92.
- Jammer M. (1966), Conceptual development of quantum mechanics, N. Y.
- Jauch J. M., Hill E. (1940), Phys. Rev. **57**, 641.
- Jauch J. M. (1957), Helv. Phys. Acta **30**, 143.
- Jauch J. M. (1968), Foundations of quantum mechanics, Addison-Wesley.
- Jost R. (1947), Helv. Phys. Acta **20**, 356.
- Jost R., Pais A. (1951), Phys. Rev. **82**, 840.
- Judge D., Lewis J. T. (1963), Phys. Lett. **5**, 190.
- Judge D. (1964), Nuovo Cim. **31**, 332.
- Källén G., Pauli W. (1955), Dansk. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. **30**, № 7.
- Kantor P. (1965), Ann. Phys. **33**, 196.
- Kapur P., Peierls R. (1938), Proc. Roy. Soc. **A166**, 277.
- Kato M. (1965), Ann. Phys. **31**, 130.
- Kato T. (1967), Suppl. to Prog. Theor. Phys., № 40, 3.
- Kazes E. (1959), Nuovo Cim. **14**, 815.
- Kazes E. (1960), Nuovo Cim. **15**, 537.
- Kazes E. (1965), J. Math. Phys. **6**, 1772.
- Keller J. B., Kay I., Shmoys J. (1956), Phys. Rev. **102**, 557.
- Keller J. B. (1958), Ann. Phys. **4**, 180.
- Keller J. B., Rubinow S. I. (1960), Ann. Phys. **9**, 24.
- Kenschaff R., Amado R. (1964), J. Math. Phys. **5**, 1340.
- Khuri N. N., Pais A. (1964), Rev. Mod. Phys. **36**, 590.
- Kibble T. W. (1968A), J. Math. Phys. **9**, 315.
- Kibble T. W. B. (1968B), Phys. Rev. **173**, 1527.
- Kibble T. W. B. (1968C), Phys. Rev. **174**, 1882.
- Kibble T. W. B. (1968D), Phys. Rev. **175**, 1624.
- Kimball G. (1940), J. Chem. Phys. **8**, 188.
- Klauder J. R., Sudarshan E. C. G. (1968), Fundamentals of Quantum Optics, N. Y., Benjamin.
- Kramers H. A. (1926), Zs. f. Phys. **39**, 828.
- Kramers H. A. (1938), Hand und Jahrbuch der Chemischer Physik **1**, 312.
- Kramers H. A. (1951), Quantum mechanics, North Holland Publ. Co.
- Kumar K. (1965), J. Math. Phys. **6**, 1923, 1928.
- Lamb H. (1900), Proc. Lond. Math. Soc. **32**, (1), 208.
- Lane A., Thomas R. (1958), Rev. Mod. Phys. **30**, 257; А. Лейн, Р. Томас, Теория ядерных реакций при низких энергиях, ИЛ, 1960.
- Laplace P. S. (1829), Traité de mecanique celeste, T. 1, p. 160, Paris, Bachelier.
- Lee T. D. (1954), Phys. Rev. **95**, 1329.
- Lee T. D., Yang C. N. (1956), Phys. Rev. **104**, 254.
- Lenz W. (1924), Zs. f. Phys. **24**, 197.
- Levinson N. (1949), Dan. Vid. Selsk. Math. Fys. Medd. **25**, № 9.
- Levy M. (1959), Nuovo Cim. **13**, 115.
- Lewis H. R., Riesenfeld W. B. (1969), J. Math. Phys. **10**, 1458.

- Liouville J. (1837), *J. de Math.* **2**, 16, 418.
 Lippmann B., Schwinger J. (1950), *Phys. Rev.* **79**, 469.
 Lippmann B. (1965), *Phys. Rev. Lett.* **15**, 11.
 London F. (1950), *Superfluids*, v. 1, J. Wiley, N. Y.
 Love A. (1904), *Proc. Lond. Math. Soc.* **2**, 288.
 Lüders G. (1955), *Zs. f. Naturforsch.* **10a**, 581.
 Ma S. (1947), *Phys. Rev.* **71**, 195.
 Manning I. (1964), *J. Math. Phys.* **5**, 1223.
 Martin A. (1961), *Suppl. Nuovo Cim.* **21**, 157.
 McColl L. (1932), *Phys. Rev.* **40**, 621.
 McGuire (1964), *J. Math. Phys.* **5**, 622.
 Meixner J. (1933), *Math. Zs.* **36**, 677.
 Meyman N. N., Slavnov A. A. (1964), *Phys. Lett.* **10**, 124.
 Möller C. (1946), *Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd.* **22**, № 19.
 Moses H., Tuan S. (1959), *Nuovo Cim.* **13**, 197.
 Mott N. (1929), *Proc. Roy. Soc.* **126**, 79.
 Muta T. (1965), *Progr. Theor. Phys.* **33**, 666.
 Ne'eman Y. (1961), *Nucl. Phys.* **26**, 222.
 Newton R. G. (1961), *Ann. of Phys.* **14**, 333.
 Newton R. G. (1966), *Scattering theory of waves and particles*.
 N. Y.; Ньютон Р., Теория рассеяния волн и частиц, «Мир»,
 1969.
 Northrop T. G., Teller E. (1960), *Phys. Rev.* **117**, 215.
 Nussenzweig H. (1959), *Nucl. Phys.* **3**, 499.
 Nussenzweig H. (1960), *Physica* **26**, 209.
 Nussenzweig H. (1961), *Nuovo Cim.* **20**, 694.
 O'Malley T. F., Spruch L., Rosenberg L. (1961), *J. Math.*
Phys. **2**, 491.
 Onsager L. (1949), *Suppl., Nuovo Cim.* **6**, 279.
 Pagnamenta A. (1965), *J. Math. Phys.* **6**, 955.
 Pais A., Wu T. T. (1964), *J. Math. Phys.* **5**, 799.
 Park D. (1960), *Zs. f. Phys.* **159**, 155.
 Pauli W. (1926), *Zs. f. Phys.* **36**, 336.
 Pauli W. (1933), *Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*,
 Springer, Berlin; В. Паули, Общие принципы волновой меха-
 ники, Гостехиздат, 1947.
 Pauli W. (1939), *Helv. Phys. Acta* **12**, 147.
 Peierls R. (1959), *Proc. Roy. Soc.* **A253**, 16.
 Petzold I. (1959), *Zs. f. Phys.* **155**, 422.
 Poincaré H. (1884), *Acta Math.* **4**, 215.
 Polkinghorne J. C. (1958), *Proc. Camb. Phil. Soc.* **54**, 560.
 Power E., Saavedra I. (1961), *Proc. Camb. Phil. Soc.* **57**, 121.
 Racah G. (1951), *Group theory and spectroscopy*, Lecture notes,
 Princeton.
 Rayleigh, (J. W. Strutt) (1871), *Phil. Mag.* **41**, 107, 274, 447.
 Rayleigh (1910), *Phil. Mag.* **20**, 1001; Рэлей, Теория звука,
 т. 2, § 287, Гостехиздат, 1944.
 Rayleigh, (1912), *Proc. Roy. Soc.* **86A**, 207.
 Regge T. (1958), *Nuovo Cim.* **8**, 671.
 Rollnik H. (1956), *Zs. f. Phys.* **145**, 639, 654.
 Rosenfeld L. (1965), *Nucl. Phys.* **70**, 1.

- Ruderman M., Gasiorowicz S. (1958), *Nuovo Cimento* **8**,
 861.
 Runge C. (1919), *Vektoranalysis*, Bd. 1, S. 68, Hirzel, Leipzig.
 Schiff L. (1963), *Phys. Rev.* **132**, 2194.
 Schrödinger E. (1926A), *Naturwiss.* **14**, 664.
 Schrödinger E. (1926B), *Ann. d. Phys.* **80**, 437.
 Schützer W., Tiomno I. (1947), *Phys. Rev.* **83**, 249.
 Schwarz C. (1959), *Ann. of Phys.* **6**, 156, 170, 178.
 Schwinger J. (1953), *Phys. Rev.* **91**, 728.
 Schwinger J. (1960A), *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **47**, 122.
 Schwinger J. (1960B), *Ann. of Phys.* **9**, 169.
 Schwinger J. (1964), *J. Math. Phys.* **5**, 1606.
 Segal I. E. (1963), *Mathematical problems of relativistic physics*,
 Providence; И. Сигал, Математические проблемы релятивист-
 ской физики, «Мир», 1968.
 Sexl T. (1933), *Zs. f. Phys.* **81**, 163.
 Sharp D. H. (1965), *High energy physics and elementary particles*,
 p. 273, IAEA, Vienna.
 Smith F. (1960), *Phys. Rev.* **118**, 349.
 Sommerfield Ch. (1965), *J. Math. Phys.* **6**, 1170.
 Srivastava P. (1963), *Phys. Rev.* **131**, 461.
 Suskind L., Glogower J. (1964), *Physics* **1**, 49.
 Thirring W. (1962A), *Nuovo Cim.* **23**, 1064.
 Thirring W. (1962B), *Phys. Rev.* **126**, 1209.
 Thomas L. H. (1935), *Phys. Rev.* **47**, 903.
 Thomson J. J. (1884), *Proc. Lond. Math. Soc.* **15** (1) 197.
 Titchmarsh E. C. (1946), *Eigenfunction expansions associated*
with second-order differential equations. Oxford; Э. Ч. Титч-
 марш, Разложения по собственным функциям, связанные с диф-
 ференциальными уравнениями второго порядка, ИЛ, 1960.
 Trees R. (1956), *Phys. Rev.* **102**, 1553.
 Tucker W. H., Gould R. J. (1966), *Astrophys. J.* **144**, 244.
 van der Waerden B. L., Ed. (1967), *Sources of quantum mecha-*
tics, North-Holland.
 van Kampen N. G. (1953), *Phys. Rev.* **91**, 1267.
 van Vleck J., Sherman A. (1935), *Rev. Mod. Phys.* **7**, 167.
 van Winter C. (1968), *Ann. Phys.* **47**, 232.
 Vogt E., Wannier G. (1954), *Phys. Rev.* **95**, 1190.
 von Neumann J. (1929), *Zs. f. Phys.* **57**, 30.
 von Neumann J., Wigner E. P. (1929), *Phys. Zs.* **30**, 465.
 von Neumann J. (1961), *Collected works*, v. I, 550, Pergamon
 Press.
 von Neumann J. (1931), *Math. Ann.* **104**, 570.
 von Neumann J. (1932), *Mathematische Grundlagen der Quanten-*
mechanik Springer, Berlin; И. фон Нейман, Математические
 основы квантовой механики, «Наука», М. (1964).
 von Neumann J. (1938), *Composito Math.* **6**, 1.
 Warnock F. (1963), *Phys. Rev.* **131**, 1320.
 Weinberg S. (1956), *Phys. Rev.* **102**, 285.
 Weinberg S. (1963), *Phys. Rev.* **131**, 440.
 Wellner M. (1964), *Amer. J. Phys.* **32**, 787.

- Wentzel G. (1926), Zs. f. Phys. 38, 518.
 Weyl H. (1910), Math. Ann. 68, 220.
 Weyl H. (1928), Gruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig, Hirzel.
 Wheeler J. A. (1937), Phys. Rev. 52, 1107.
 Wightman A. S., Schweber S. (1955), Phys. Rev. 98, 812.
 Wightman A. S. (1964), Introduction to some aspects of the relativistic dynamics of quantized fields, Cargese, (1964); А. Вайтман, Проблемы в релятивистской динамике квантованных полей, «Наука», 1968.
 Wigner E. P. (1932), Gött. Nachr. (Math. Natur. Klasse) 31, 546.
 Wigner E. P. (1935), Math. u. Natur. Anz. Ungar. Akad. Wiss. 53, 475.
 Wigner E. P., Eisenbud L. (1947), Phys. Rev. 72, 29.
 Wigner E. P. (1948), Phys. Rev. 73, 1002.
 Wigner E. P. (1954), Phys. Rev. 94, 77.
 Wigner E. P. (1955), Phys. Rev. 98, 145.
 Wigner E. P. (1959), Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra, N. Y., Academic Press; Е. Вигнер, Теория групп, ИЛ, 1961.
 Wigner E. P. (1964), Science 145, 995; УФН 85, 727 (1965).
 Winter R. (1961), Phys. Rev. 123, 1503.
 Wong D., Toll J. (1957), Ann. of Phys. 1, 91.
 Wu C. S., Ambler E., Hayward R. W., Hoppes D. D., Hudson R. P. (1957), Phys. Rev. 105, 1413.
 Yang C. N. (1968), Phys. Rev. 168, 1920.
 Zachariassen F. (1961), Phys. Rev. 121, 1851.

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК АВТОРОВ ИНОСТРАННЫХ ПУБЛИКАЦИИ

- | | |
|---------------------|----------------------------------|
| Айзенбад — Eisenbud | Брениг — Brenig |
| Амблер — Ambler | Бриллюэн — Brillouin |
| Амадо — Amado | Бруссаар — Brussaard |
| Арбузов — Arbusov | Буржесс — Burgess |
| Байерс — Byers | Бьёркен — Bjorken |
| Бандер — Bander | Вайтман — Wightman |
| Баргманн — Bargmann | ван дер Варден — van der Waerden |
| Бардин — Bardeen | ван Винтер — van Winter |
| Бейкер — Baker | ван Кампен — van Kampen |
| Бейтмен — Bateman | ван Льювен — van Leuven |
| Бейтс — Bates | ван Флек — van Vleck |
| Белл — Bell | Ванье — Wannier |
| Бертран — Bertrand | Варнок — Warnock |
| Bete — Bethe | Ватсон — Watson |
| Биркгоф — Birkhoff | Вейль — Weyl |
| Бойд — Boyd | Вейнберг — Weinberg |
| Борн — Born | Вейрих — Weinrich |
| Боутен — Bouten | Велнер — Wellner |
| Бракнер — Bruckner | Вентцель — Wentzel |
| Брейт — Breit | |

- | | |
|---------------------------|----------------------------|
| Вигнер — Wigner | Кристенсон — Christenson |
| Винтер — Winter | Кронин — Cronin |
| Вонг — Wong | Кумар — Kumar |
| Ву — Wu | Купер — Cooper |
| Газирович — Gasiorowicz | Лаплас — Laplace |
| Гамов — Gamow | Лейн — Lane |
| Гарвин — Garwin | Леви — Levy |
| Гебель — Goebel | Левинсон — Levinson |
| Гейзенберг — Heisenberg | Ледерман — Lederman |
| Гелл-Манн — Gell-Mann | Ленц — Lenz |
| Герджой — Gerjuoy | Ли — Lee |
| Герни — Gurney | Липпманн — Lippmann |
| Глаубер — Glauber | Лиувилль — Liouville |
| Глоговер — Glogower | Лондон — London |
| Гольдберг — Goldberg | Льюис — Lewis |
| Гольдбергер — Goldberger | Лэмб — Lamb |
| Гольден — Golden | Людерс — Lüders |
| Гордон — Gordon | Ляв — Love |
| Гоулд — Gould | Ма — Ma |
| Дайсон — Dyson | Маене — Maene |
| Далиц — Dalitz | Мак-Гир — McGuire |
| Дашен — Dashen | Мак Колл — McColl |
| де Альфаро — de Alfaro | Мандельштам — Mandelstam |
| Джадж — Judge | Маннинг — Manning |
| Дике — Dicke | Мартэн — Martin |
| Дирак — Dirac | Мейкснер — Meixner |
| Захариасен — Zachariassen | Мейман — Meuman |
| Ида — Ida | Мёллер — Möller |
| Иордан — Jordan | Мозес — Moses |
| Ициксон — Itzykson | Мотт — Mott |
| Йост — Jost | Мошинский — Moshinsky |
| Калоджеро — Calogero | Мута — Muta |
| Кантор — Kantor | Нееман — Ne'eman |
| Капур — Kapur | Нито — Nieto |
| Каррузерс — Carruthers | Нортроп — Northrop |
| Кастильехо — Castillejo | Нуссенцвейг — Nussenzweig |
| Като — Kato | Ньютон — Newton |
| Кей — Kay | О'Маллей — O'Malley |
| Кейзес — Kazes | Онзегер — Onsager |
| Кейс — Case | Пагнамента — Pagnamenta |
| Келлер — Keller | Пайерлс — Peierls |
| Кеншафт — Kenschafft | Пайс — Pais |
| Киббл — Kibble | Парк — Park |
| Кимбалл — Kimball | Паули — Pauli |
| Клаудер — Klauder | Пауэр — Power |
| Когельник — Kogelnik | Петцольд — Petzold |
| Коддингтон — Coddington | Полкингхорн — Polkinghorne |
| Кондон — Condon | Пратт — Pratt |
| Коульсон — Coulson | Пуанкаре — Poincaré |
| Козн — Cohen | Рака — Raca |
| Краммерс — Kramers | Редже — Regge |

Ризенфельд — Riesenfeld	Фраучи — Frautschi
Розенберг — Rosenberg	Фруассар — Froissart
Розенфельд — Rosenfeld	Хааг — Haag
Рольник — Rollnik	Хадсон — Hudson
Рубинов — Rubinow	Хаммермеш — Hammermest
Рудерман — Ruderman	Хартман — Hartman
Рунге — Runge	Хаусдорф — Hausdorf
Рэлей — Rayleigh	Хединг — Heading
Сааведра — Saavedra	Хейворд — Hayward
Саммерфилд — Sommerfield	Хибс — Hibbs
Сексл — Sexl	Хиршфельдер — Hirschfelde
Сигал — Segal	Хольцмарк — Holtzmark
Славнов — Slavnov	Хоппес — Hoppes
Смит — Smith	Хостлер — Hostler
Солпитер — Salpeter	Ху — Hu
Сривастава — Srivastava	Хури — Khuri
Сударшан — Sudarshan	Хусими — Husimi
Сусскинд — Susskind	Хюльтен — Hülthen
Теллер — Teller	Чадан — Chadan
Терлей — Turley	Челлен — Källen
Тиомно — Tiomno	Чью — Chew
Тирринг — Thirring	Шарп — Sharp
Титчмарш — Titchmarsh	Шварц — Schwarz
Толл — Toll	Швебер — Schweber
Толхоек — Tolhoek	Швингер — Schwinger
Томас — Thomas	Шифф — Schiff
Томсон — Thomson	Шмойс — Shmoys
Трис — Trees	Шпрух — Spruch
Туан — Tuan	Шредингер — Schrödinger
Тукер — Tucker	Шриффер — Schriifer
Уилер — Wheeler	Шютцер — Schützer
Умбле — Humblet	Эбель — Ebel
Уолтер — Walter	Эйзенхарт — Eisenhart
Факсен — Faxen	Эйринг — Eyring
Фаулер — Fowler	Эккарт — Eckart
Фейнман — Feynman	Экштейн — Ekstein
Ферми — Fermi	Эллиот — Elliot
Филиппов — Filippov	Эпштейн — Epstein
Финберг — Feenberg	Эрдейи — Erdelyi
Фитч — Fitch	Эренфест — Ehrenfest
Фогт — Vogt	Яммер — Jammer
Фок — Fock	Янг — Yang
фон Нейман — von Neumann	Яух — Jauch