

Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет

Квантовая физика

Том 3

Нестационарные возмущения, рассеяние, реакции

Учебное пособие

Автор: Зелевинский В. Г.

Редактор перевода: д.ф.-м.н. Дмитриев В. Ф.

Рецензент: д.ф.-м.н., профессор Сербо В. Г.

Учебное пособие содержит современное изложение основных фундаментальных положений квантовой физики с их применением в атомной и ядерной физике. В третьем томе курса подробно рассматривается поведение квантовых систем под действием внешних полей, зависящих от времени. Развита теория иллюстрируется приложениями к широкому кругу конкретных проблемам, включающих взаимодействие фотонов и заряженных частиц с атомами и ядрами. Изложение материала в каждой из 10 глав осуществляется по принципу от простого к сложному. Разделы глав, наряду с теорией, включают задачи и их решения в количестве, достаточном для полноценного усвоения материала. Издание предназначено для студентов физических и физико-технических факультетов университетов.

Учебное пособие подготовлено в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ на 2009–2018 гг.

Оглавление

1	Нестационарные возмущения	1
1.1	Вероятность перехода	1
1.2	Теория возмущений	2
1.3	Формальное разложение в ряд	5
1.4	Адиабатические возмущения	9
1.5	Адиабатическая теория возмущений	10
1.6	Неадиабатические переходы	13
1.7	Геометрическая фаза	16
1.8	Внезапные возмущения	19
1.9	Процессы встряхивания	23
2	Периодические возмущения	27
2.1	Золотое правило	27
2.2	Выход за первый порядок	30
2.3	Вырожденные состояния	31
2.4	Квазиэнергия	33
2.5	Конечные состояния в континууме	35
2.6	Приближение вращающегося поля	41
2.7	Взаимодействие с квантованным полем	45
2.8	Одетые состояния	49
2.9	Сверхизлучение	50
3	Рассеяние быстрых заряженных частиц	55
3.1	Сечение рассеяния	55
3.2	Резефордовское рассеяние	58
3.3	Статический формфактор	60
3.4	Экранировка	63
3.5	Возбуждение и ионизация атомов	66
3.6	Потери энергии	68

3.7	Кулоновское возбуждение	71
4	Фотоны	75
4.1	Введение: классическое и квантовое поле	75
4.2	Гамильтоново описание поля излучения	76
4.3	Квантование поля излучения	80
4.4	Волновая функция фотона	85
4.5	Векторные сферические гармоники	87
4.6	Эффект Казимира	90
4.7	Формула суммирования Эйлера-Маклорена	92
4.8	Лэмбовский сдвиг	94
4.9	Взаимодействие излучения с веществом	98
5	Излучение и поглощение фотонов	101
5.1	Коэффициенты Эйнштейна; мазеры и лазеры	101
5.2	Фотопоглощение	106
5.3	Длинноволновый предел	107
5.4	Высшие мультипольные переходы	110
5.5	Индucedированное и спонтанное излучение	113
5.6	Дипольное излучение	114
5.7	Правила отбора и примеры	116
5.8	Фотоэффект	120
6	Дисперсия и рассеяние света	125
6.1	Макроскопическое описание	125
6.2	Линейный отклик	126
6.3	Принцип причинности	128
6.4	Функция диэлектрической проницаемости	131
6.5	Свойства дисперсии	134
6.6	Квантовое затухание	137
6.7	Дисперсионные соотношения	139
6.8	Формализм рассеяния	140
6.9	Сечение рассеяния	142
6.10	Когерентное рассеяние	145
6.11	Резонансная флуоресценция	146
6.12	Рассеяние на множественных центрах	148
7	Основы квантовой теории рассеяния	151
7.1	Рассеяние и наблюдаемые	151
7.2	Сечение классического рассеяния	152

7.3	Матрица рассеяния	156
7.4	Вероятность перехода в единицу времени	158
7.5	Борновское приближение	159
7.6	Уравнение непрерывности	162
7.7	Упругое рассеяние	163
7.8	Унитарность и оптическая теорема	165
7.9	Функция Грина	167
7.10	Борновский ряд	171
7.11	Применимость борновского приближения	173
7.12	Рассеяние при высоких энергиях	176
8	Метод парциальных волн	179
8.1	Анализ парциальных волн	179
8.2	Упругое и неупругое сечения	181
8.3	Упругие фазы рассеяния	183
8.4	Аналитичность	184
8.5	Рассеяние при низких энергиях: примеры	186
8.6	Фазы и их зависимость от энергии	190
8.7	Длина рассеяния	194
8.8	Резонансное рассеяние при низких энергиях	197
8.9	Эффективный радиус	201
8.10	Рассеяние со спин-орбитальным взаимодействием	202
8.11	Поляризация и азимутальная асимметрия	206
9	Дополнительные вопросы теории рассеяния	211
9.1	Классическое и квантовое рассеяние	211
9.2	Квазиклассическая амплитуда	212
9.3	Квазиклассические фазы	214
9.4	Связь с приближением эйконала	218
9.5	Дифракционное рассеяние	219
9.6	Дифракция на чёрной сфере	221
9.7	Оптическая модель	224
9.8	Многократное рассеяние в среде	227
9.9	Когерентное рассеяние на кристаллах	231
10	Реакции, распады и резонансы	235
10.1	Каналы реакции	235
10.2	Матрица рассеяния для многоканальных реакций	237
10.3	Детальное равновесие	239

10.4	Сечения для медленных частиц	241
10.5	Пороги и унитарность	243
10.6	Изолированные резонансы; экспоненциальный и не экспонен- циальный распады	247
10.7	Квантовый эффект Зенона	248
10.8	Резонансное сечение	254
10.9	Унитарность и сверх-излучение	256
10.10	Угловой момент и чётность	258
10.11	Узкий резонанс как составная система	260
10.12	Интерференция резонанса и потенциального рассеяния	261
Литература		267

Старая идея статического пейзажа,
который подобен вечно звучащей
струне, должна быть забыта,
поскольку такой пейзаж существует
только в нашем воображении.

Д. Б. Боткин, *Неблагозвучные
гармонии*

Глава 1

Нестационарные возмущения

1.1 Вероятность перехода

Для замкнутой системы с гамильтонианом \hat{H}^0 , не зависящим от времени, и соответствующим спектром E_n стационарных состояний $|n\rangle$,

$$\hat{H}^0|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad (1.1)$$

в общем случае, любой нестационарный волновой пакет

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)|n\rangle \quad (1.2)$$

эволюционирует так, что со временем меняются лишь относительные фазы компонент (квантовые биения). Амплитуда вероятности обнаружения системы в n -том стационарном состоянии равна

$$a_n(t) = a_n(0)e^{-(i/\hbar)E_nt}, \quad (1.3)$$

поэтому вероятности

$$w_n(t) = |a_n(t)|^2 = |a_n(0)|^2 \quad (1.4)$$

не зависят от времени. Средняя энергия системы также не зависит от времени,

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n w_n. \quad (1.5)$$

Эволюция системы меняется, если на систему наложено зависящее от времени возмущение $\hat{H}'(t)$. Полный гамильтониан системы,

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'(t), \quad (1.6)$$

по-прежнему является оператором эволюции,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = [\hat{H}^0 + \hat{H}'(t)] |\Psi(t)\rangle, \quad (1.7)$$

хотя больше не соответствует сохраняющейся энергии. Мгновенный вектор состояния $|\Psi(t)\rangle$, как и раньше, может быть представлен суперпозицией (1.2) невозмущённых стационарных состояний. Физически амплитуды $a_n(t)$ отвечают измерению с помощью внезапного выключения возмущения $\hat{H}'(t)$. Как будет детально показано ниже, при внезапном возмущении, (см. т. 1, задача 3.3), волновая функция не успевает измениться и её значение в этот момент служит начальным состоянием для дальнейшей эволюции управляемой опять невозмущённым, независимым от времени гамильтонианом. Тогда, w_n перестаёт меняться и может быть измерена.

С зависящим от времени \hat{H}' эволюция волновой функции не сводится к изменению фаз. Абсолютная величина вероятностей w_n теперь меняется со временем, что может быть обнаружено в экспериментах с отключением возмущения в различные моменты времени. Даже если в момент времени t_0 , в волновой функции $|\Psi(t_0)\rangle$ отсутствовали какие-то компоненты $|n\rangle$, они могут появиться в последующие моменты. Это означает, что нестационарное возмущение может вызывать *квантовые переходы* в состояния отличные от начального. Если вероятность перехода мала, $\ll 1$, то возмущение можно считать слабым, что позволяет развить специальную форму теории возмущений, зависящих от времени. Подчеркнём, что здесь речь идёт о вероятностях переходов между невозмущёнными стационарными состояниями.

1.2 Теория возмущений

Для нахождения приближённого решения зависящего от времени уравнения (1.7) удобно использовать суперпозицию (1.2) с амплитудами $a_n(t)$ переопределёнными таким образом, чтобы экспоненциальная зависимость от времени невозмущённых состояний (1.3) была выделена явно,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-(i/\hbar)E_n t} |n\rangle. \quad (1.8)$$

Оставшаяся зависимость от времени амплитуд $a_n(t)$ порождается только возмущением $\hat{H}'(t)$. Преобразование от старых амплитуд в (1.2) к новым в (1.8) носит название переход к *представлению взаимодействия*; в математике это *метод вариации постоянных*

Подставляя волновую функцию (1.8) в уравнение Шредингера (1.7) и определение (1.1) стационарных состояний, мы получаем систему связанных дифференциальных уравнений для новых амплитуд $a_m(t)$, зависимость от времени которых порождается только возмущением $\hat{H}'(t)$,

$$i\hbar\dot{a}_m = \sum_n H'_{mn}(t)a_n(t)e^{i\omega_{mn}t}, \quad \omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}, \quad (1.9)$$

где матричные элементы H'_{mn} возмущения $\hat{H}'(t)$ берутся между независимыми от времени базисными векторами. Система (1.9) всё ещё эквивалентна полному уравнению Шредингера. Трансформируя её в систему интегральных уравнений мы можем явно учесть начальные условия $a_m(t_0)$,

$$a_m(t) = a_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \sum_n H'_{mn}(t')a_n(t')e^{i\omega_{mn}t'}. \quad (1.10)$$

Дальнейшие приближения могут различаться в зависимости от конкретных физических условий, связанных с силой и характером возмущения.

Пусть возмущение действует в течение ограниченного интервала времени. В прошлом, в отдалённый момент времени, $t_0 \rightarrow -\infty$, система находилась в одном из невозмущённых стационарных состояний. Назовём это состояние *начальным* обозначая его $|i\rangle$ и предполагая, что оно принадлежит дискретному спектру, так что $a_n(-\infty) = \delta_{ni}$. В режиме теории возмущений вероятности переходов малы. Поэтому $a_i(t)$ остаётся близким к единице, а $|a_{n \neq i}| \ll 1$ для новых возникающих компонент. Для $m \neq i$, в правой части (1.9) мы оставляем только большую амплитуду $a_i \approx 1$ и приближённо получаем:

$$i\hbar\dot{a}_m \approx H'_{mi}(t)a_i(t)e^{i\omega_{mi}t} \approx H'_{mi}(t)e^{i\omega_{mi}t}. \quad (1.11)$$

Таким образом, амплитуда вероятности найти систему в *конечном состоянии* $|f\rangle$, также дискретного спектра, равна

$$a_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' H'_{fi}(t')e^{i\omega_{fi}t'}, \quad (1.12)$$

а *вероятность перехода* $i \rightarrow f$ даётся выражением

$$w_{fi}(t) = |a_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t dt' H'_{fi}(t')e^{i\omega_{fi}t'} \right|^2. \quad (1.13)$$

Таким образом, мы оправдываем использованное ранее понятие о матричном элементе H_{fi} , как о величине связанной с *амплитудой перехода*. Если говорить на языке *виртуальных* состояний, то переход в другое состояние может "случиться" в любой момент времени $t' < t$, при этом возникает скачок фазы. Далее, мы должны учесть интерференцию всех переходов происходящих в различные моменты времени t' . Поскольку мы предположили, что возмущение перестаёт действовать в пределе

$$w_{fi} = |a_f(t \rightarrow \infty)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt' H'_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} \right|^2, \quad (1.14)$$

определяется фурье-гармоникой возмущения с *частотой равной частоте перехода* ω_{fi} . Можно сказать, что в пределе бесконечного времени энергия должна полностью сохраняться, что обеспечивает передачу точной величины энергии $E_f - E_i$ от источника (или к источнику), которым является внешнее поле. Приближение (1.11) справедливо тогда, когда поправки высшего порядка малы.

Задача 1.1

Импульс конечной длительности пространственно однородного электрического поля

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-t^2/\tau^2} \quad (1.15)$$

действует на заряженную частицу помещённую в потенциал гармонического осциллятора с частотой ω . В приближении слабого поля найти вероятность возбуждения после действия импульса частицы из основного состояния в одно из возбуждённых состояний осциллятора. Установить условия применимости теории возмущений. Рассмотреть случаи малой и большой длительности импульса τ по сравнению с периодом колебаний (при одинаковой величине переданного частице импульса). Рассмотреть колебания вдоль поля.

Решение Оператор возмущения имеет вид

$$\hat{H}'(t) = -e\mathcal{E}(t)\hat{x} = -e\mathcal{E}(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \quad (1.16)$$

В низшем порядке теории возмущений возможен переход только в первое возбуждённое состояние $n = 0 \rightarrow n = 1$ под действием оператора рождения \hat{a}^\dagger . Вероятность перехода (1.14) для импульса поля $E(t) = E_0 f(t)$ дётся

выражением

$$w_{10} = \frac{1}{\hbar^2} (e\mathcal{E}_0)^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{i\omega t} \right|^2. \quad (1.17)$$

Для гауссова импульса (1.15),

$$w_{10} = \frac{\pi e^2 \mathcal{E}_0^2 \tau^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2 \tau^2 / 2}. \quad (1.18)$$

Полная передача импульса системе равна

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} dt e\mathcal{E}(t) = \sqrt{\pi} e\mathcal{E}_0 \tau. \quad (1.19)$$

Можно сравнить импульсы одинаковой мощности, но различной длительности,

$$w_{10} = \frac{P^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2 \tau^2 / 2}. \quad (1.20)$$

Средняя энергия переданная осциллятору может быть найдена следующим образом:

$$\Delta E = \hbar\omega w_{10} = \frac{P^2}{2m} e^{-\omega^2 \tau^2 / 2}. \quad (1.21)$$

При любой длительности теория возмущений справедлива если $\Delta E \ll \hbar\omega$. Короткий импульс (с длительностью τ много меньше периода осцилляций, $\omega\tau \ll 1$) передаёт всю энергию $P^2/2m$, в то время как длинный импульс, $\omega\tau \gg 1$, неэффективен, переданная энергия экспоненциальна мала и осциллятор остаётся в основном состоянии. Физическая причина этого лежит в быстро-осциллирующем характере движения; действие поля компенсируется в различных частях периода. Это общее правило - медленно (*адиабатически*) меняющееся возмущение не может возбудить систему. Система остаётся в своём первоначальном состоянии с волновой функцией адиабатически подстраивающейся к медленно меняющемуся возмущению и возвращающейся назад при выключении возмущения. Ниже мы рассмотрим адиабатический случай более детально.

1.3 Формальное разложение в ряд

Если нас интересует переход $i \rightarrow f$ в котором матричный элемент H_{fi} аномально мал или равен нулю, то необходимо учесть следующий порядок

теории возмущений. Точная система интегральных уравнений (1.10) может быть проитерирована,

$$a_m(t) = a_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \sum_n H'_{mn}(t_1) e^{i\omega_{mn}t_1} a_n(t_0) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \sum_{ns} H'_{mn}(t_1) H'_{ns}(t_2) e^{i\omega_{mn}t_1 + i\omega_{ns}t_2} a_s(t_2). \quad (1.22)$$

Используя опять начальное условие $t_0 \rightarrow -\infty$, $a_n(-\infty) = \delta_{ni}$, и оставляя в итерированном (третьем) члене (1.22) главный вклад $s = i$ Находим амплитуду перехода $i \rightarrow f \neq i$ во втором порядке,

$$a_f(t) \approx a_f^{(1)}(t) + a_f^{(2)}(t), \quad (1.23)$$

где $a_f^{(1)}$ даётся (1.12), а

$$a_f^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \sum_n H'_{fn}(t_1) H'_{ni}(t_2) e^{i\omega_{fn}t_1 + i\omega_{ni}t_2} \quad (1.24)$$

Включая члены второго порядка мы видим, что кроме прямого перехода $i \rightarrow f$ возможен двухступенчатый процесс $i \rightarrow n \rightarrow f$ через промежуточные или виртуальные состояния (см. том 1, раздел 5.10). Вероятность перехода по-прежнему $w_{fi} = |a_f(t)|^2$, хотя теперь она включает интерференцию одноступенчатого и всех двухступенчатых путей. Очевидно, что этот результат справедлив только тогда, когда можно пренебречь вкладами высших порядков.

Каждый оператор возмущения \hat{H}' сопровождается соответствующей фазой зависящей от времени. Это связано с упоминавшимся выше представлением взаимодействия. Унитарный оператор невозмущённой временной эволюции

$$\hat{U}^\circ(t) = \exp[-(i/\hbar)\hat{H}^\circ t] \quad (1.25)$$

включён в волновые функции, как в (1.2) и (1.3). Соответственно, чтобы сохранить неизменными физические амплитуды мы преобразуем операторы, $\hat{H}' \Rightarrow \check{H}$,

$$\check{H}'_{mn}(t) = \langle m | \left(\hat{U}^\circ(t) \right)^{-1} \hat{H}'(t) \hat{U}^\circ(t) | n \rangle = H'_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}. \quad (1.26)$$

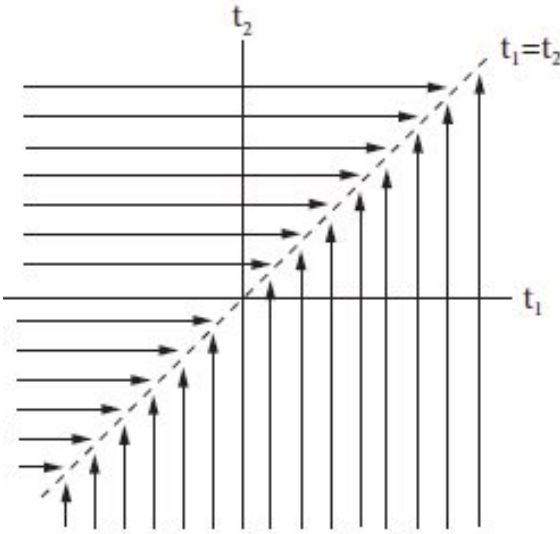


Рис. 1.1. Структура области интегрирования во втором приближении.

Представление взаимодействия является промежуточным между представлениями Шрёдингера и Гейзенберга. Здесь операторы \hat{O} сохраняют свою *невозмущённую временную зависимость*, как это было бы гейзенберговском представлении в отсутствие возмущения, а временная зависимость индуцированная возмущением H' остаётся в волновых функциях.

Рассмотрим теперь структуру второй итерации (1.24). Как видно из рис. 1.1, область интегрирования является частью (t_2, t_1) -плоскости ограниченной сверху диагональю $t_1 = t_2$. Сначала мы интегрируем при фиксированном $t_1 < t$, вдоль вертикальной линии $-\infty < t_2 < t_1$, а затем по всем возможным значениям t_1 от $-\infty$ до t . Если поменять порядок интегрирования, то интегрирование $\int_{-\infty}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1$ идёт по той же площади и мы можем сложить эти два интегрирования разделив результат на два. Во втором слагаемом можно также заменить переменные $t_2 \leftrightarrow t_1$, так что результат может быть представлен как

$$a_f^{(2)}(t) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \times \\ \times \left\{ \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \left(\ddot{H}'(t_1) \ddot{H}'(t_2) \right)_{fi} + \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \left(\ddot{H}'(t_2) \ddot{H}'(t_1) \right)_{fi} \right\}. \quad (1.27)$$

Здесь мы интегрируем (с фактором $1/2$) по всей плоскости до t в обеих областях, $t_1 < t_2$ и $t_1 > t_2$. Два оператора \hat{H}' хронологически упорядочены: оператор с более поздним временем стоит слева. Вводя символ T - хронологического произведения операторов, можно представить результат, как

$$a_f^{(2)}(t) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \Upsilon \left\{ \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \left(\ddot{H}'(t_1) \ddot{H}'(t_2) \right)_{fi} \right\}. \quad (1.28)$$

Итерации могут быть продолжены тем же путём. Результат записывается в виде бесконечного ряда

$$a_f(t) = \sum_{n=1} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^t dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \left(\ddot{H}'(t_1) \dots \ddot{H}'(t_n) \right)_{fi}. \quad (1.29)$$

В n -том члене ряда переход происходит через $n - 1$ промежуточных состояний и каждый оператор \hat{H}' берётся в представлении взаимодействия. Операторы $\hat{H}'(t)$, взятые в разные моменты времени, в общем случае не коммутируют и их порядок в ряде (1.29) фиксирован хронологическим упорядочиванием - время возрастает справа налево. Можно использовать все $n!$ перестановок времён интегрирования и, после переобозначений, привести каждый член ряда к виду, аналогичному a_2 , сохраняя при этом везде хронологический порядок. Можно также распространить результат на $f = i$ добавляя член нулевого порядка $1_{fi} = \delta_{fi}$. Получившийся ряд очень напоминает разложение экспоненты, но с временным упорядочиванием в каждом члене,

$$a_f(t) = \delta_{fi} + \sum_{n=1} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \Upsilon \left\{ \int_{-\infty}^t dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \left(\ddot{H}'(t_1) \dots \ddot{H}'(t_n) \right)_{fi} \right\}. \quad (1.30)$$

Обычно, его записывают в виде T -экспоненты,

$$a_f(t) = \Upsilon \left\{ \exp \left[-(i/\hbar) \int_{-\infty}^t dt' \ddot{H}'(t') \right] \right\}_{fi}. \quad (1.31)$$

Это символическое выражение может быть полезно при выводе общих формул, но оно обычно не помогает в конкретных расчётах, когда ряд должен вычисляться приближённо и обрываться на каком-то шаге.

1.4 Адиабатические возмущения

Если возмущение $\hat{H}'(t)$ является плавной функцией времени, например, меняясь заметно только в течение большого интервала времени $\sim \tau$, его фурье-разложение может иметь заметные компоненты только для малых частот $\omega \leq \omega_0 = 1/\tau$. Тогда переходы с большими частотами $\omega_{fi} \geq \omega_0$ подавлены. Мы уже видели это в задаче 1.1 в пределе $\omega\tau > 1$. Такие медленно меняющиеся возмущения называются адиабатическими. Более точно, для адиабатического возмущения по отношению к переходу $i \rightarrow f$, изменение энергии за период, $\delta t \sim 1/\omega_{fi}$, должно быть мало по сравнению с энергией перехода $E_f - E_i = \hbar\omega_{fi}$:

$$\delta H \sim \frac{\delta H'}{\delta t} \delta t \sim \frac{dH'_{fi}}{dt} \frac{1}{\omega_{fi}} \ll \hbar\omega_{fi}. \quad (1.32)$$

Уже простая оценка показывает, что при выполнении условия (1.32) вероятность перехода мала. Пусть, например, возмущение \hat{H}' плавно включается в момент времени $t = 0$ и выключается при $t = \bar{t}$. При $t > \bar{t}$ переходы уже закончились и полная вероятность перехода есть

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{\bar{t}} dt H'_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} \right|^2. \quad (1.33)$$

Интегрируя это выражение по частям мы можем преобразовать его как

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \left[\frac{e^{i\omega_{fi}t}}{i\omega_{fi}} H'_{fi}(t) \right]_0^{\bar{t}} - \frac{1}{i\omega_{fi}} \int_0^{\bar{t}} dt e^{i\omega_{fi}t} \frac{dH'_{fi}(t)}{dt} \right|^2, \quad (1.34)$$

или учитывая граничные условия для \hat{H}' ,

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \int_0^{\bar{t}} dt e^{i\omega_{fi}t} \frac{dH'_{fi}(t)}{dt} \right|^2. \quad (1.35)$$

Предполагая плавное поведение производной \dot{H}'_{fi} , вынесем из под интеграла её максимальное абсолютное значение в квадрате и вычислим оставшийся

интеграл,

$$w_{fi} \leq \frac{4 \sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\hbar^2 \omega_{fi}^4} \left| \frac{dH'_{fi}}{dt} \right|^2. \quad (1.36)$$

Верхний предел вероятности перехода пропорционален квадрату малого параметра адиабатичности $|\dot{H}'_{fi}|^2/(\hbar\omega_{fi})^2$, что находится в согласии с оценкой (1.32).

Мы видим, что в случае, когда возмущение включается и выключается адиабатически, реальные переходы довольно слабые. Внутри интервала $0 < t < \bar{t}$ вероятность перехода может быть заметной благодаря вкладу верхнего предела в интегральном члене (1.34). Это значит, что вектор состояния $|\Psi(t)\rangle$ отличается от начального вектора $|i\rangle$ внутри этого интервала. Если бы мы мгновенно выключили возмущение в некоторый момент внутри интервала и разложили бы $|\Psi(t)\rangle$ по стационарным состояниям $|f\rangle$, мы нашли бы заметную вероятность переходов $i \rightarrow f$. Эти вероятности обязаны, главным образом, резкому выключению возмущения. В адиабатическом режиме вектор состояния $|\Psi(t)\rangle$ плавно меняется, подстраиваясь к медленно меняющемуся возмущению. В длительном процессе волновая функция может значительно меняться. Однако, при $t > \bar{t}$, система с большой вероятностью вернётся к исходному состоянию.

1.5 Адиабатическая теория возмущений

В нашей оценке (1.36) мы видели, что хотя мы начинали со стандартной теории возмущений, действительная малость была обусловлена не малостью возмущения, а, скорее, медленностью его изменения. В этом случае можно развить специальный вариант теории возмущений, где не требуется малости возмущения $\hat{H}'(t)$. Вместо этого, малым параметром будет *скорость изменения* возмущения в смысле неравенства (1.32). За большой временной интервал медленный дрейф вектора состояния может привести в конце к значительному его изменению.

В *адиабатической теории возмущений* нет смысла разбивать гамильтониан на невозмущённую часть и возмущение, как это сделано в (1.6). Вместо этого мы предположим, что гамильтониан зависит от некоторых параметров $X_i(t)$, которые являются плавными функциями времени, $\hat{H}(t) = \hat{H}(X(t))$. Мы знаем уже, что вектор состояния будет меняться, приспособившись к эволюции $X(t)$. При этом плавном изменении эволюционирующее основное состояние будет оставаться основным, первое возбуждённое останется первым возбуждённым и т.д. Адиабатический уровень динамики напоминает

ламинарный поток в отсутствие всякой турбулентности (как пример, можно взять реалистический спектр ядерных уровней при сильном смешивании, том 1, рис 19.1). Чем меньше $dX/dt \equiv \dot{X}$, тем точнее будет этот ламинарный характер потока.

При фиксированном значении X мы находим набор стационарных состояний $|n; X\rangle$ гамильтониана $\hat{H}(X)$,

$$\hat{H}(X)|n; X\rangle = E_n(X)|n; X\rangle. \quad (1.37)$$

Набор мгновенных состояний $|n; X\rangle$ может использоваться в качестве плавающего адиабатического базиса вместо фиксированного базиса, использовавшегося в (1.8). Обычная фаза $-E_n t/\hbar$ должна быть заменена на полную динамическую фазу, набегающую в течение процесса.

$$\varphi_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' E_n(X(t')). \quad (1.38)$$

Она подобна пространственной фазе $\int k dx$ квазиклассической волновой функции в плавно меняющемся потенциале. В каждый момент времени плавающий базис (1.37) является полным и мы можем искать решение уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(X(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (1.39)$$

В форме разложения по мгновенным функциям $|n; X(t)\rangle$,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{i\varphi_n(t)} |n; X(t)\rangle. \quad (1.40)$$

В крайнем адиабатическом пределе волновая функция будет просто следовать за изменением $X(t)$ вдоль энергетического терма в пространстве параметров. В реальности, из-за конечной скорости движения \dot{X} в этом пространстве, ещё возможны *переходы* между адиабатическими термами, которые описываются остаточной временной зависимостью амплитуд $a_n(t)$ в (1.40). Временная производная функции (1.40) равна

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \sum_n e^{i\varphi_n(t)} \left[\dot{a}_n - \frac{i}{\hbar} E_n(X(t)) a_n + a_n \dot{X} \frac{\partial}{\partial X} \right] |n; X(t)\rangle, \quad (1.41)$$

где учтено, что

$$\hat{H}(t) |\Psi\rangle = \sum_n e^{i\varphi_n(t)} a_n E_n(X(t)) |n; X(t)\rangle. \quad (1.42)$$

При фиксированном t и $X = X(t)$ состояния $|n; X(t)\rangle$ ортонормированны. Поэтому, проекция на $\langle m; X(t)|$ даёт для каждого m ,

$$\dot{a}_m + \dot{X} \sum_n B_{mn}(t) a_n e^{i[\varphi_n(t) - \varphi_m(t)]} = 0, \quad (1.43)$$

где роль возмущения, индуцирующего переходы, играют матричные элементы градиента волновой функции по параметрам,

$$B_{mn}(t) = \left\langle m; X(t) \left| \frac{\partial}{\partial X} \right| n; X(t) \right\rangle. \quad (1.44)$$

Система уравнений (1.43) всё ещё точная. Амплитуды a_n в плавающем базисе меняются со временем только из-за наличия \dot{X} - изменения параметров. Если мы имели в далёком прошлом, $t \rightarrow -\infty$, набор коэффициентов $a_n^0 \equiv a_n(-\infty)$ и эволюция является адиабатической, то можно ожидать, что амплитуды a_m будут почти постоянными, хотя сами базисные состояния могут значительно измениться. *Адиабатическая теория возмущений* использует разложение по \dot{X} ,

$$a_m = a_m^0 + a_m^{(1)}(t) + \dots \quad (1.45)$$

В первом порядке из (1.43) мы получаем

$$\dot{a}_m^{(1)} = -\dot{X} \sum_n B_{mn}(t) a_n^0 e^{i[\varphi_n(t) - \varphi_m(t)]}. \quad (1.46)$$

Решение в первом порядке даётся интегралом по времени

$$a_m^{(1)}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' \sum_n B_{mn}(t') \dot{X}(t') e^{i[\varphi_n(t') - \varphi_m(t')]} a_n^0. \quad (1.47)$$

Для вычисления вероятности переходов рассмотрим определённое начальное состояние $a_n^0 = \delta_{ni}$. С помощью уравнения (19.36) из тома 1 получаем из (1.47) для конечного состояния $f \neq i$:

$$a_f^{(1)}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' \frac{\left\langle f; X(t') \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial X} \right| i; X(t') \right\rangle}{E_i(X(t')) - E_f(X(t'))} \dot{X}(t') e^{i[\varphi_i(t') - \varphi_f(t')]}. \quad (1.48)$$

Этот результат очень напоминает обычную теорию возмущений. Обобщение на вычисление высших порядков адиабатического приближения представляется очевидным.

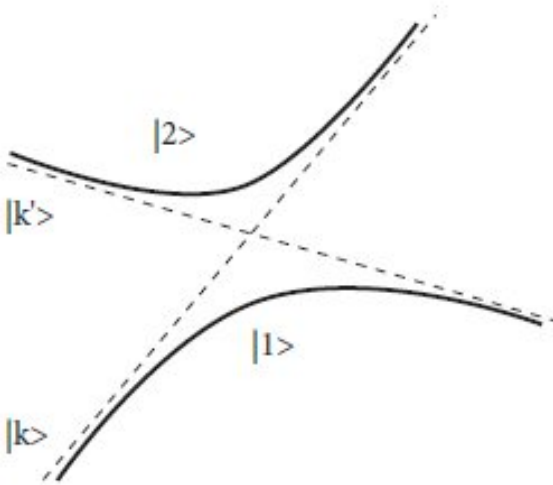


Рис. 1.2. Диабатические и адиабатические термы.

1.6 Неадиабатические переходы

Адиабатическое приближение в форме (1.48) нарушается вблизи точек пересечения уровней. Сильное сближение различных адиабатических термов $E(t)$ приводит к росту амплитуды перехода. Тогда, по аналогии со стандартной теорией возмущений для близких уровней, низшее приближение становится недостаточным и необходимо диагонализировать гамильтониан внутри этой подсистемы уровней и находить правильные линейные комбинации. Общий результат может уже быть виден в случае двух близких уровней.

Рассмотрим типичную ситуацию, когда два адиабатических энергетических терма системы, $|k, t\rangle$ и $|k', t\rangle$ пересекают друг друга в момент времени, который мы примем за $t = 0$, рис.1.2. В отсутствие взаимодействия способного смешивать эти состояния (или в случае различной симметрии термов, что запрещает их смешивание) мы бы имели *диабатические* термы $\varepsilon_k(t)$ и $\varepsilon_{k'}(t)$ показанные на рис. 1.2 пунктирными линиями. Если имеется матричный элемент смешивания $H_{k'k} \equiv V$, то *адиабатические* уровни 1 и 2 отталкиваются друг от друга и вместо диабатического пересечения мы имеем адиабатическое *псевдопересечение*, показанное сплошными линиями на рис. 1.2. При этом, матричный элемент смешивания определяет мгновенное расстояние между уровнями (см том 1, уравнение 10.39).

Начнём с нижнего состояния $\varepsilon_k(t)$ в далёком прошлом, $t \rightarrow -\infty$. При медленном изменении уровней $\varepsilon(t)$ и слабом взаимодействии $V(t)$ *адиабатическая эволюция* будет идти вдоль терма 1. При этом волновая функция плавно трансформируется из $|k, -\infty$ в $|k', \infty$. Система всегда будет оставаться в нижнем энергетическом состоянии, в то время как верхний терм будет оставаться пустым. В противоположность этому, в *диабатическом режиме* быстрого прохождения система будет двигаться вдоль невозмущённого терма k, t . В общем случае процесс характеризуется *вероятностью перехода* P из 1 в 2, которая фактически есть вероятность остаться в состоянии $|k\rangle$. Эта вероятность стремится к нулю в адиабатическом пределе и к 1 в противоположном случае быстрого прохождения.

Двухуровневая система описывается зависящим от времени гамильтонианом

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} \varepsilon_k(t) & V^*(t) \\ V(t) & \varepsilon_{k'}(t) \end{pmatrix}. \quad (1.49)$$

В предположении слабого взаимодействия, заметная вероятность перехода существует только вблизи точки пересечения $t = 0$. Главная зависимость от времени здесь может быть записана как

$$\varepsilon_{k,k'}(t) \approx u_{k,k'}t, \quad V(t) \approx V(0) \equiv V \quad (1.50)$$

(линейное поведение термов приближающихся к точке пересечения, $u_k > u_{k'}$). В точке пересечения теория возмущений не работает. Однако, как в квазиклассическом приближении, можно попытаться "обойти" опасную точку для нахождения вероятности перехода (прыжка) через энергетическую щель между термами 1 и 2, подобно тому, как сшивались два квазиклассических решения по разные стороны от точки поворота в координатном пространстве.

При больших $|t|$, когда расстояние между уровнями $|(u_k - u_{k'})t|$ велико по сравнению с матричным элементом смешивания $|V|$, можно использовать обычную стационарную теорию возмущений. Тогда, адиабатические термы ведут себя как

$$E_k(t) = u_k t + \frac{|V|^2}{(u_k - u_{k'})t} + \dots, \quad (1.51)$$

где опущенные члены имеют энергетические знаменатели с более высокими степенями t . Разложение (1.51) определяет адиабатическую фазу (1.38),

$$\varphi_k(t) = -\frac{u_k t^2}{2\hbar} - \frac{|V|^2}{\hbar(u_k - u_{k'})} \ln t + \dots \quad (1.52)$$

не выписанные явно члены не растут при больших t . Далее, мы действуем как в квазиклассике (см. том 1, разделы 15.9-15.12) распространяя решение на комплексные значения t . Мы предполагаем, что можно в комплексной плоскости t обойти точку пересечения $t = 0$ вдоль дуги радиуса T , который достаточно велик, чтобы можно было пренебречь опущенными в (1.51) членами, но достаточно мал, чтобы приближение (1.50) было справедливо.

По большой дуге $t = T \exp(i\alpha)$ мы должны связать отдалённое будущее, $\alpha = 0$, с отдалённым прошлым, $\alpha = \pm\pi$, где знак зависит от направления обхода по контуру. При больших T , главный член, $\propto T^2$, в фазе (1.52) ведёт себя как

$$i\varphi_k \Rightarrow \frac{u_k T^2}{2\hbar} (-i) e^{2i\alpha} = \frac{u_k T^2}{2\hbar} [-i \cos(2\alpha) + \sin(2\alpha)]. \quad (1.53)$$

Когда мы приближаемся к действительной оси при $\alpha \rightarrow \pm\pi$, реальная часть в (1.53) даёт экспоненциально большой фактор, когда $\sin(2\alpha) > 0$; это фиксирует направление обхода по верхней дуге. В конечной точке мы имеем $t = T \exp(i\pi)$ и логарифмическая часть фазы (1.52) даёт $\ln(t) = \ln(T) = i\pi$. В результате амплитуда приобретает вещественный экспоненциальный множитель

$$A = e^{(i\pi)(-i/\hbar)|V|^2/(u_k - u_{k'})} = e^{\pi|V|^2/[\hbar(u_k - u_{k'})]}. \quad (1.54)$$

Амплитуда волны нижнего состояния $|k\rangle$ при больших отрицательных t больше, чем амплитуда того же состояния при больших положительных t на фактор A (поскольку $u_k > u_{k'}$). Таким образом, вероятность адиабатического перехода через энергетическую щель между двумя адиабатическими уровнями даётся

$$P = \frac{1}{A^2} = e^{-2\pi|V|^2/[\hbar(u_k - u_{k'})]}. \quad (1.55)$$

Вероятность остаться на адиабатической траектории есть $1 - P$.

Здесь мы следовали подходу [Shy2004] для вывода *вероятности перехода Ландау-Зенера* [Lan1932, Zen1932]. При очень малых скоростях, $\hbar\Delta u \ll |v|^2$, мы возвращаемся к экстремально адиабатическому режиму, $P \rightarrow 0$. Однако, такая маленькая вероятность не может быть получена в рамках обычной теории возмущений - результат имеет неаналитическую зависимость от $(u_k - u_{k'})$. При быстром проходе, $\hbar\Delta u \gg |v|^2$, вероятность перехода близка к единице. Этот результат имеет широкую область применимости, от столкновений молекул с электронными переходами между различными энергетическими термами до ядерных реакций. Он может также быть обобщён на случай множественных пересечений [Dem2000, Shy2004] в приближении последовательности парных переходов.

1.7 Геометрическая фаза

Предположим, что внешние параметры $X \equiv X_i(t)$ меняются со временем крайне медленно и описав замкнутую траекторию в пространстве параметров, возвращаются к своим первоначальным значениям. В таком адиабатическом процессе реальными переходами в другие состояния можно пренебречь, поэтому волновая функция $|\Psi\rangle$ также вернётся в своё начальное состояние. При этом, волновая функция, из-за квантовой динамики, может приобрести *геометрическую фазу* (М. Berry [Ber1984]), которую не следует путать с обычной динамической фазой (1.38).

Если стартовать при $t = 0$ со стационарного состояния $|n; X(0)\rangle$, то решение уравнения Шрёдингера (1.39) при дальнейшей адиабатической эволюции может быть представлено в форме единственного члена $|n; X(t)\rangle$ в суперпозиции (1.40), но с неизвестной дополнительной фазой $\beta_n(t)$,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\varphi_n(t)} e^{i\beta_n(t)} |n; \mathbf{X}(t)\rangle. \quad (1.56)$$

Как и при выводе (1.43), проектируя на компоненту мгновенного вектора состояния $|n; X(t)\rangle$, мы приходим к уравнению для новой фазы,

$$-i\dot{\beta}_n(t) = \sum_i \left\langle n; \mathbf{X}(t) \left| \frac{\partial}{\partial X_i} \right| n; \mathbf{X}(t) \right\rangle \dot{X}_i(t), \quad (1.57)$$

или, вводя формальный вектор градиента в пространстве параметров ∇_X ,

$$-i\dot{\beta}_n(t) = \langle n; \mathbf{X}(t) | \nabla_{\mathbf{X}} | n; \mathbf{X}(t) \rangle \cdot \dot{\mathbf{X}}(t). \quad (1.58)$$

После очень медленного и длинного перехода мы замыкаем контур C и возвращаемся в начальную точку в пространстве параметров. Полная приобретённая фаза β_n даётся тогда интегралом по замкнутому контуру,

$$\beta_n = i \oint_C dt \langle n; \mathbf{X}(t) | \nabla_{\mathbf{X}} | n; \mathbf{X}(t) \rangle \cdot \dot{\mathbf{X}}(t) = i \oint_C d\mathbf{X} \cdot \langle n; \mathbf{X} | \nabla_{\mathbf{X}} | n; \mathbf{X} \rangle. \quad (1.59)$$

Здесь временные характеристики произвольного медленного процесса исчезли и окончательное выражение имеет чисто геометрическую трактовку с величиной фазы зависящей, в общем случае, от контура C . Поскольку состояния $|n; X\rangle$ предполагаются нормированными при всех значениях параметров,

$$\langle n; \mathbf{X} | n; \mathbf{X} \rangle = 1, \quad (1.60)$$

мы видим, что

$$\langle \nabla_{\mathbf{X}}(n; \mathbf{X}) | n; \mathbf{X} \rangle \equiv \langle n; \mathbf{X} | \nabla_{\mathbf{X}} | (n; \mathbf{X}) \rangle^* = -\langle n; \mathbf{X} | \nabla_{\mathbf{X}} | n; \mathbf{X} \rangle. \quad (1.61)$$

Следовательно, подынтегральное выражение в (1.59) является мнимым, а фаза β_n действительна,

$$\beta_n(\mathcal{C}) = -\text{Im} \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{X} \cdot \langle n; \mathbf{X} | \nabla_{\mathbf{X}} | n; \mathbf{X} \rangle. \quad (1.62)$$

Задача 1.2

Показать, что фаза β_n инвариантна по отношению к выбору общей фазы $\alpha(X)$ векторов состояния $|n; X\rangle$, которые предполагаются однозначными функциями параметров, $|n; X\rangle \Rightarrow \exp(i\alpha(X))|n; X\rangle$ - аналог градиентного преобразования.

Решение Использовать условие нормировки (1.60) и тот факт, что интеграл по замкнутому контуру от градиента однозначной функции равен нулю.

В одномерном пространстве параметров замкнутый контур есть проход вперёд и назад по одному и тому же пути, поэтому геометрическая фаза равна нулю. Следуя [1], рассмотрим случай трёхмерного пространства параметров, где формулы векторного анализа помогут в получении результата. Интеграл (1.62) по замкнутому контуру есть циркуляция вектора $\langle n | \nabla | n \rangle$, где мы опустили аргумент X . Циркуляция может быть преобразована в интеграл от плотности потока ротора этого вектора через поверхность S , натянутую на контур \mathcal{C} в пространстве параметров,

$$\beta_n(\mathcal{C}) = -\text{Im} \int_S d\vec{S} \cdot \text{curl} \langle n | \nabla | n \rangle = -\text{Im} \int dS_i \varepsilon_{ijk} \nabla_j \langle n | \nabla_k | n \rangle. \quad (1.63)$$

Симметричный по производным член $\sim \nabla_j \nabla_k | n \rangle$ исчезает, так что

$$\beta_n(\mathcal{C}) = -\text{Im} \int dS_i \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_j n | \nabla_k n \rangle \equiv -\text{Im} \int d\vec{S} \cdot \langle \nabla n | \times | \nabla n \rangle. \quad (1.64)$$

Другая форма этого результата получается при использовании тождества (см. том 1, формула 19.36) для *недиагональных* матричных элементов параметрического градиента. Если вставить полный набор состояний $|n'; X\rangle$ между градиентами в (1.64), то диагональный вклад с $n' = n$ исчезает из-за (1.61) и мы получаем геометрическую фазу, как поток,

$$\beta_n(\mathcal{C}) = -\int d\vec{S} \cdot \mathbf{V}_n(\mathbf{X}), \quad (1.65)$$

вектора Берри,

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{X}) = \text{Im} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n : \mathbf{X} | \nabla_{\mathbf{X}} \hat{H} | n' : \mathbf{X} \rangle \times \langle n' : \mathbf{X} | \nabla_{\mathbf{X}} \hat{H} | n : \mathbf{X} \rangle}{[E_{n'}(\mathbf{X}) - E_n(\mathbf{X})]^2}. \quad (1.66)$$

Следуя [1], мы можем рассмотреть пример частицы со спином \mathbf{s} в статическом магнитном поле $\vec{\mathcal{B}}$ и стандартным гамильтонианом

$$\hat{H}(\vec{\mathcal{B}}) = -g\hbar(\hat{\mathbf{s}} \cdot \vec{\mathcal{B}}). \quad (1.67)$$

Компоненты $\vec{\mathcal{B}}$ являются нашими параметрами X , в то время как текущее состояние $|m\rangle$ характеризуется проекцией спина $s_z = m$ на медленно меняющееся направление поля, характеризуемое единичным вектором $\mathbf{b} = \vec{\mathcal{B}}/|\mathcal{B}|$, и энергией $E_m = -g\hbar mB$.

Задача 1.3

Найти вектор Берри $V_m(\mathbf{b})$ для этого примера.

Решение Вектор Берри даётся уравнением

$$\mathbf{V}_m(\vec{\mathcal{B}}) = \text{Im} \sum_{m' \neq m} \frac{\langle m | \mathbf{s} | m' \rangle \times \langle m' | \mathbf{s} | m \rangle}{\mathcal{B}^2(m' - m)^2}, \quad (1.68)$$

где текущее состояние $|m\rangle$, так же как и промежуточные состояния $|m'\rangle$ берутся при текущем значении поля $\vec{\mathcal{B}}$. Выбирая направление поля за ось z при вычислении (1.68) и используя матричные элементы углового момента находим, что вектор Берри направлен вдоль той же оси z , что естественно, так как направление поля - единственное выделенное направление в данном примере. Действительно, поперечные компоненты $V_{x,y}$ обращаются в ноль, поскольку для них требуется, чтобы один из матричных элементов в числителе был бы матричным элементом s_z , который не имеет недиагональных матричных элементов. Для z -компоненты имеем,

$$V_z = \text{Im} \sum_{m'} \frac{(s_x)_{mm'}(s_y)_{m'm} - (s_y)_{mm'}(s_x)_{m'm}}{\mathcal{B}^2(m - m')^2}, \quad (1.69)$$

и так как здесь $m - m' = \pm 1$, можно воспользоваться полнотой промежуточных состояний и получить

$$V_z = \frac{1}{\mathcal{B}^2} \text{Im} \sum_{m'} [(s_x)_{mm'}(s_y)_{m'm} - (s_y)_{mm'}(s_x)_{m'm}] = \frac{1}{\mathcal{B}^2} \text{Im} [\hat{s}_x, \hat{s}_y]_{mm} = \frac{m}{\mathcal{B}^2}.$$

$$(1.70)$$

Таким образом,

$$\mathbf{V}_m(\vec{B}) = \frac{m}{B^2} \mathbf{b} = \frac{m}{B^3} \vec{B} = -m \nabla_B \frac{1}{B}. \quad (1.71)$$

Результат (1.71) показывает, что поле вектора Берри в этом случае есть поле "заряда" m помещённого в начало координат пространства магнитных параметров. Другими словами, это поле *монополя* порождённого точкой вырождения уровней энергии. Фаза Берри (1.65) в этом случае вычисляется по *теореме Гаусса* и равна

$$\beta_m(\mathcal{C}) = -m\Omega(\mathcal{C}), \quad (1.72)$$

где $\Omega(\mathcal{C})$ есть видимый из начала координат телесный угол поверхности натянутой на контур \mathcal{C} . Этот результат справедлив как для целого, так и для полуцелого спина s . Для спина $1/2$ полный поворот в плоскости на угол 2π порождает телесный угол $\Omega = 2\pi$. При этом спинорная волновая функция приобретает множитель $\exp(i\beta_{\pm 1/2}) = -1$ в согласии со свойствами группы $SU(2)$, см. том 1, раздел 20.1.

Результат последнего примера не зависит от величины спина и, следовательно от степени вырождения состояний в отсутствие магнитного поля. В общем случае, сингулярности связанные с пересечением уровней при некоторых значениях параметров (особые точки) являются источниками геометрической фазы. Это можно увидеть на примере пересечения двух уровней. Эффективный гамильтониан этой пары уровней (сравните с (1.49)) всегда может быть записан через матрицы Паули как пропорциональный $(\sigma \cdot \mathbf{X})$, где коэффициенты \mathbf{X} являются соответствующими параметрами (единичная матрица не даёт смешивания). Тогда, мы возвращаемся к примеру с магнитным полем и спином $s = 1/2$, где вектор Берри (1.71) равен

$$V_{\pm 1/2} = \mp \frac{1}{2} \frac{\mathbf{X}}{|\mathbf{X}|^3}. \quad (1.73)$$

Геометрическая фаза здесь даётся по-прежнему телесным углом (1.72).

1.8 Внезапные возмущения

Этот случай является противоположным по отношению к адиабатическому. Здесь возмущение меняется настолько быстро, что его характерное

время τ оказывается малым по сравнению с обратной частотой перехода $\tau \ll 1/\omega_{fi}$. Ранее мы обсуждали случай мгновенного изменения потенциала, $\tau \rightarrow 0$, см. том 1, задача 3.3. В этом случае много фурье-компонент доступно для переходов.

Пусть возмущение $\hat{H}'(t)$ внезапно включается при $t = 0$ и адиабатически затухает при $t \rightarrow \infty$. Если возмущение слабое, то можно воспользоваться общим результатом (1.14) и, действуя подобно (1.35), выразить вероятность перехода как

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{fi}t} \frac{dH'_{fi}(t)}{dt} \right|^2. \quad (1.74)$$

В этом случае временная производная от $H'_{fi}(t)$ не мала только в течение короткого промежутка времени τ вблизи $t = 0$. Поскольку $\exp(i\omega_{fi}t)$ почти не меняется внутри этого интервала, мы можем положить экспоненту равной единице. Остающийся интеграл даёт полный скачок матричного элемента равный $H'_{fi}(t)$ (возмущение отсутствовало при $t < 0$), и следовательно

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} |H'_{fi}|^2. \quad (1.75)$$

Видно, что этот результат напоминает стационарную теорию возмущений (см. том 1, 19.16); действительно, после момента $t = 0$ слабое возмущение практически не индуцирует переходы.

В более общем случае, когда нет ограничения на силу возмущения и единственное приближение связано с **быстротой** включения возмущения (малое τ), можно развить специфическую *теорию внезапных возмущений*. Пусть гамильтониан меняется от \hat{H} до \hat{H}_1 в коротком интервале времён от $t = 0$ до $t = \tau$ оставаясь независимым от времени вне этого интервала. Тогда удобно использовать в качестве рабочего базиса полную систему $|n\rangle$ стационарных состояний *нового* гамильтониана,

$$\hat{H}_1 |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (1.76)$$

Ищем решение при $t > 0$ как суперпозицию (1.8) состояний (1.76). Учитывая, что в интервале $0 < t < \tau$ полный гамильтониан отличается от \hat{H}_1 , можно определить возмущение \hat{H}' как

$$\hat{H} = \hat{H}' + \hat{H}_1. \quad (1.77)$$

Интегрируя по времени уравнения (1.9), получаем для амплитуд перехода систему уравнений аналогичную (1.10),

$$a_m(t) = a_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^\tau dt' H'_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} a_n(t'). \quad (1.78)$$

Поскольку $\exp(i\omega_{mn}t') \approx 1$ для $0 < t' < \tau$, то

$$a_{mn}(t) \approx a_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^\tau dt' H'_{mn}(t') a_n(t'). \quad (1.79)$$

Результат (1.79) ещё более упрощается, если кроме условия $\omega_{mn}\tau \ll 1$ выполняется и неравенство

$$\frac{H'_{mn}\tau}{\hbar} \ll 1 \quad (1.80)$$

(для слабых возмущений $H'_{mn} \ll \hbar\omega_{mn}$ это выполняется автоматически в силу первого условия). В этом случае интегральный член мал и можно пользоваться итерациями. В нулевом порядке

$$a_m^\circ(t) = a_m(0). \quad (1.81)$$

Это выражение совпадает с тем, которое получилось в "наивном" подходе, использованном в задаче 3.3, в первом томе: начальный вектор состояния есть суперпозиция новых стационарных состояний,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_m a_m(0)|m\rangle, \quad a_m(0) = \langle m|\Psi(0)\rangle, \quad (1.82)$$

и вероятность перехода $|\Psi(0)\rangle \rightarrow |f\rangle$ даётся

$$w_{f0} = |\langle f|\Psi(0)\rangle|^2. \quad (1.83)$$

При мгновенном включении возмущения вектор состояния $|\Psi(0)\rangle$ не успевает измениться и служит начальным волновым пакетом для дальнейшей эволюции под действием гамильтониана \hat{H}_1 . Для нахождения вероятностей перехода достаточно знать вес различных новых стационарных состояний в начальной суперпозиции, то есть, разложить $|\Psi(0)\rangle$ по собственным функциям \hat{H}_1 . После $t = \tau$ эти компоненты эволюционируют независимо, приобретая соответствующую фазу.

| Задача 1.4

Для слабого возмущения получить результат (1.75) пользуясь стандартной теорией возмущений, зависящих от времени.

Итерируя начальное решение (1.81) в интегральном члене (1.78), находим поправку первого порядка, обусловленную конечным временем включения возмущения,

$$a_m^{(1)}(t) = a_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n a_n(0) \int_0^t dt' H'_{mn}(t'). \quad (1.84)$$

Используя значение (1.82) амплитуд $a_n(0)$ и полноту системы (1.76), мы приходим к

$$\begin{aligned} a_m^{(1)}(t) &= \langle m | \Psi(0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t dt' H'_{mn}(t') \langle n | \Psi(0) \rangle \\ &= \langle m | \Psi(0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle m | \hat{H}'(t') | \Psi(0) \rangle. \end{aligned} \quad (1.85)$$

Вероятность перехода в этом приближении есть

$$w_{f,0}^{(1)} = \left| \langle f | \Psi(0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^\tau dt' \langle f | \hat{H}'(t') | \Psi(0) \rangle \right|^2. \quad (1.86)$$

Задача 1.5

Слабое внешнее поле, приложенное к системе находящейся в исходном состоянии $|i\rangle$ зависит от времени как,

$$\hat{H}'(t) = g(t) \hat{A}, \quad g(t) = \frac{1}{1 + e^{t/\tau}}. \quad (1.87)$$

Найти вероятности перехода в конечное состояние $|f\rangle$ и рассмотреть пределы внезапных и адиабатических возмущений.

Решение В рамках теории возмущений, вероятность перехода дается

$$w_{fi} = \frac{|A_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{fi}t} g(t) \right|^2. \quad (1.88)$$

Для вычисления Фурье-компоненты, мы можем замкнуть контур по дуге большого радиуса в верхней части комплексной плоскости, $Im(t) > 0$; вклад дуги равен нулю (мы предполагаем $\omega_{fi} > 0$). Полюса $g(t)$ внутри контура расположены вдоль положительной части мнимой оси, $t_n = i\pi(2n+1)$, где

$n = 0, 1, \dots$ Знаменатель вблизи этих точек равен $-(t - t_n)/\tau$, а соответствующие вычеты равны $\exp(-\omega_{fi}\pi\tau(2n + 1))$. Их сумма есть геометрическая прогрессия, которая может быть выражена через гиперболический синус,

$$w_{fi} = \frac{|A_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{\pi\tau}{\sinh(\pi\omega_{fi}\tau)} \right|^2. \quad (1.89)$$

Возмущение $g(t)$ изменяется от единицы в прошлом, $t \rightarrow -\infty$, до нуля в будущем, $t \rightarrow \infty$ (сглаженная ступенька). Для очень плавного изменения, которое длится много периодов, результат экспоненциально мал,

$$w_{fi} \approx \frac{|A_{fi}|^2}{\hbar^2} 4\pi^2\tau^2 e^{-2\pi\omega_{fi}\tau}, \quad \omega_{fi}\tau \gg 1, \quad (1.90)$$

это типичный адиабатический результат. Для очень резких изменений, получаем

$$w_{fi} \approx \frac{|A_{fi}|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2}, \quad \omega_{fi}\tau \ll 1, \quad (1.91)$$

в согласии с приближением внезапного возмущения (1.75). Глядя на далёкие Фурье компоненты (большие частоты перехода), можно увидеть, общее математическое свойство: когда подынтегральное выражение не имеет особенностей на вещественной оси, этот предельно далёкий хвост экспоненциально мал, (1.90). При $\tau \rightarrow 0$, особенности накапливаются вблизи вещественной оси, и асимптотика имеет только степенное спадание (1.91). Можно также отметить, что Функция $g(t)$ описывает распределение частиц по уровням энергии в Ферми-газе, при этом t соответствует энергии отсчитанной от поверхности Ферми, а τ есть температура T . Положения полюсов на мнимой оси соответствуют так называемым *частотам Мацубары* $\omega_n = \pi T(2n + 1)$, которые играют важную роль в статистической физике Ферми-систем.

1.9 Процессы встраивания

Типичная ситуация, когда можно говорить о внезапном возмущении атома возникает в случае резкого воздействия внешнего агента на атомное ядро. Это может быть, например, β -распад с внезапным изменением ядерного состава (нейтрон \leftrightarrow протоном) и эмиссии позитрона (или электрона) и нейтрино (или антинейтрино). Аналогичный процесс происходит, когда

система претерпевает быстрый толчок от энергичной внешней частицы или электромагнитного поля, а время взаимодействия так мало, что можно считать, что гамильтониан составляющих, электронов в атоме или нуклонов в ядре, внезапно изменяется. Для нового гамильтониана прежнее состояние становится нестационарным, включая в том числе в принципе, компоненты (1.76), соответствующие континууму. Это означает, что резкое воздействие на ядро может привести к ионизации атома: грубо говоря, ядро получает толчок, в то время как электроны (или слабо связанные нуклоны) не улавливают его. В таких случаях мы говорим о процессах *встряскивания*.

Пусть ядро внезапно получает импульс \mathbf{Q} , его волновая функция $\Psi_N(\mathbf{R})$ умножается на фактор $\exp[(i/\hbar)(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R})]$. Это следует из рассмотрения оператора сдвига в импульсном пространстве, $\hat{K}(\mathbf{Q})$. В полной аналогии с оператором сдвига $\hat{D}(\mathbf{a})$ в координатном пространстве, см. том 1, раздел 4.5, оператор $\hat{K}(\mathbf{Q})$ должен действовать в импульсном пространстве, как

$$\hat{K}(\mathbf{Q})\Phi(\mathbf{p}) = \Phi(\mathbf{p} - \mathbf{Q}). \quad (1.92)$$

Таким оператором является

$$\hat{K}(\mathbf{Q}) = e^{(i/\hbar)(\mathbf{Q} \cdot \hat{\mathbf{R}})}, \quad (1.93)$$

а в координатном представлении волновая функция ядра $\Psi_N(\mathbf{R})$ просто умножается на $\exp[(i/\hbar)(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R})]$. Стационарными волновыми функциями электронов в новой ситуации были бы их нормальные атомные функции, движущиеся вместе с ядром. Если приобретённая скорость ядра массы M есть $\mathbf{V} = \mathbf{Q}/M$, то электрон с массой m получит такую же скорость $\mathbf{v} = \mathbf{V}$, если его приобретённый импульс будет равен $\mathbf{q} = m\mathbf{V} = (m/M)\mathbf{Q}$. Это отвечает новым стационарным функциям,

$$\Psi_n(\{\mathbf{r}_a\}) \rightarrow \Psi_n(\{\mathbf{r}_a\})e^{(i/\hbar)\mathbf{q} \cdot \sum_a \mathbf{r}_a}. \quad (1.94)$$

Вместо этого, на данный момент, у нас еще есть старая волновая функция электрона, скажем Ψ_0 для основного состояния, у которой не было времени измениться за время толчка. Вероятность для электронов оказаться в возбужденном состоянии $|f\rangle$ после этого воздействия определяется перекрытием (1.83) модифицированной функции Ψ_f , (1.82), с первоначальной волновой функцией основного состояния,

$$w_{f0} = \left| \langle e^{(i/\hbar)\mathbf{q} \cdot \sum_a \mathbf{r}_a} \Psi_f | \Psi_0 \rangle \right|^2 = \left| \langle \Psi_f | e^{-(i/\hbar)\mathbf{q} \cdot \sum_a \mathbf{r}_a} | \Psi_0 \rangle \right|^2. \quad (1.95)$$

В частности, вероятность выживания основного состояния атома есть

$$w_{00} = \left| \langle \Psi_0 | e^{-(i/\hbar)\mathbf{q} \cdot \sum_a \mathbf{r}_a} | \Psi_0 \rangle \right|^2. \quad (1.96)$$

Полная вероятность всех остальных процессов (возбуждения различных связанных состояний и ионизации) составляет $1 - w_{00}$. Всё рассмотрение справедливо, если время импульса $\tau \ll R_{at}/V$, то есть расстояние $V\tau$ пройденное ядром за время действия возмущения мало по сравнению с размером атома R_{at} . Величина (1.96) представляет собой так называемый атомный *форм-фактор*, он будет вновь появляться в разделе 3.3.

Задача 1.6

Найдите среднюю энергию, передаваемую электронам в процессе, когда ядро приобрело скорость \mathbf{V} .

Решение Очевидный ответ дается энергетически взвешенным правилом сумм (см. т. 1. уравнение 7.146),

$$\bar{E} = \sum_f (E_f - E_0) w_{f0} = \frac{q^2 N}{2m} = \frac{mV^2}{2} N, \quad (1.97)$$

где N есть число электронов.

Задача 1.7

Найти полную вероятность возбуждения и ионизации атома водорода (первоначально в основном состоянии) в процессе когда протон приобретает скорость \mathbf{V} в результате очень короткого импульса.

Решение Уравнение (1.96) дает для основного состояния атома водорода

$$w_{\text{exc}} = 1 - w_{00} = 1 - \frac{1}{[1 + (\hbar V/2e^2)^2]^4}. \quad (1.98)$$

В этом случае скорость $V = Q/M$ входит в отношении к типичной атомной скорости (см. т. 1. Уравнение 1.30). При $V \ll v_{at}$, атом остается в основном состоянии, если $V \gg v_{at}$, вероятность возбуждения близка к единице.

Превращение частиц в свет, а свет в
частицы очень комфортно для хода
событий в природе, которая как будто
в восторге от таких трансмутаций

Исаак Ньютон, *Оптика*

Глава 2

Периодические возмущения

2.1 Золотое правило

Здесь мы будем обсуждать часто встречающийся класс задач, которые включают в себя возмущения с периодической зависимостью от времени. Эти проблемы имеют основополагающее значение для понимания современной лазерной физики.

Из-за требования эрмитовости, запишем гамильтониан монохроматического возмущения как

$$\hat{H}'(t) = \hat{H}'e^{-i\omega t} + \hat{H}'^\dagger e^{i\omega t}. \quad (2.1)$$

Детальное рассмотрение может зависеть от способа включения и выключения возмущения. В частности, даже стационарное возмущение является частным случаем (2.1). Хотя и здесь, нас больше интересует развитие вектора состояния во времени, а не сдвиги энергии, как в стационарной теории возмущений (см. т. 1. Глава 19).

Мы начинаем с формального вывода знаменитого *золотого правила*. Предположим, что возмущение (2.1) было включено в далеком прошлом, $t = -T/2, T \rightarrow \infty$, и мы ищем вероятность перехода при $t = +T/2$. Стандартный результат для амплитуды перехода в этом длительном процессе (см. уравнение 1.12),

$$a_f = -\frac{i}{\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt \left(H'_{fi} e^{-i\omega t} + (H'^\dagger)_{fi} e^{i\omega t} \right) e^{i\omega_{fi}t}, \quad (2.2)$$

ведёт к появлению δ -функции в пределе $T \rightarrow \infty$,

$$(a_f)_{T \rightarrow \infty} = -\frac{2\pi i}{\hbar} \left(H'_{fi} \delta(\omega - \omega_{fi}) + (H'^\dagger)_{fi} \delta(\omega + \omega_{fi}) \right). \quad (2.3)$$

δ -функция выражает *сохранение энергии* в процессе бесконечной длительности. Если $\omega > 0$, то первое слагаемое описывает поглощение кванта внешнего поля, $E_f = E_i + \omega$, а второй член описывает излучение кванта $E_f = E_i - \omega$. Только эти процессы выживают при $T \rightarrow \infty$; принято говорить, что они идут *на массовой поверхности*, в отличие от виртуальных *внемассовых* процессов конечной длительности. Осциллирующие *нерезонансные* члены с $\omega \neq \pm \omega_{fi}$ усредняются до нуля во время длительного процесса. Для $\omega_{fi} \neq 0$, только одна из δ -функций работает.

Формальное вычисление вероятности перехода (см. уравнение 1.14) обнаруживает неопределенность, связанную с квадратом δ -функции. Чтобы понять Физический смысл этой неопределенности, мы представляем одну из δ -функций с фактором 2π , как интеграл по времени в виде (2.2). Тогда, первое слагаемое определяет вероятность как

$$w_{fi} = |a_f|^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2} |H'_{fi}|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}) \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i(\omega - \omega_{fi})t}. \quad (2.4)$$

Из-за присутствия первой δ -функции, экспонента под интегралом может быть положена равной единице и интеграл дает *длительность* T процесса, так что в этом пределе, вероятность перехода пропорциональна полному интервалу времени T ,

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) T. \quad (2.5)$$

Это и есть *золотое правило Ферми* для вероятности перехода в единицу времени $\dot{w}_{fi} \equiv w_{fi}/T$,

$$\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (2.6)$$

Для квантового ансамбля N идентичных систем, вероятность перехода (2.6) умноженная на N дает число переходов в ансамбле в единицу времени.

При $T \rightarrow \infty$ в (2.5) нарушается справедливость теории возмущений из-за неограниченного роста вероятности. Однако, в действительности, энергия практически уже сохраняется после нескольких периодов частоты перехода, так что можно использовать золотое правило сравнительно благополучно. Для того чтобы увидеть как возникает сохранение энергии, мы рассмотрим, вывод (2.6) более подробно. Возьмем теперь за начальный момент $t = 0$ и включим периодическое возмущение (2.1). Интегрируя по t' , как в уравнении 1.12, но от нуля до t , находим

$$a_f(t) = H'_{fi} \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)} + (H'^{\dagger})_{fi} \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} + \omega)}. \quad (2.7)$$

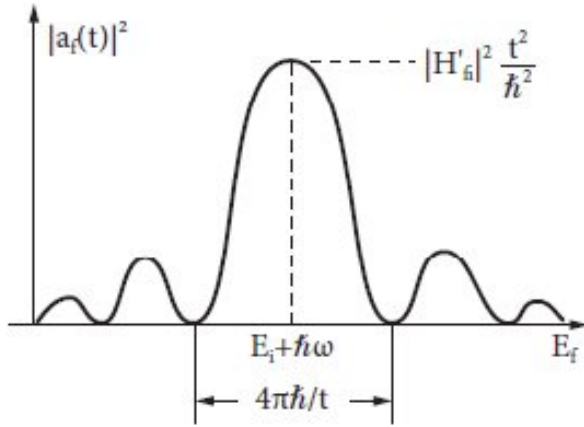


Рис. 2.1. Резонансная часть вероятности перехода за конечное время, как функция энергии конечного состояния.

Для слабого возмущения, эта амплитуда мала, если внешняя частота поля ω существенно отличается от $\pm\omega_{fi}$. Вероятность перехода становится значительной только близко к *резонансу*, когда $\omega \approx \pm\omega_{fi}$.

Пусть частота близка к резонансу в одном из знаменателей, например, $\omega \approx \omega_{fi}$. Тогда только первый член в (2.7) удовлетворяет резонансному условию и основной вклад в вероятность перехода будет

$$|a_f(t)|^2 \approx \frac{|H'_{fi}|^2}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2} 4 \sin^2 \left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2\hbar} t \right). \quad (2.8)$$

Эта вероятность показана на рис. 2.1 в зависимости от конечной энергии E_f . Максимум соответствует точному резонансу, $E_f = E_i + \hbar\omega$, а значение в максимуме возрастает $\propto t^2$. В согласии с соотношением неопределенностей, вероятность имеет заметную величину только в пределах интервала $\propto \hbar/t$ вблизи резонанса. Таким образом, при достаточно больших t (значительно больше, чем типичные периоды \hbar/ω_{fi}), функция (2.8) имеет свойства δ -функции.

Для того, чтобы найти коэффициент пропорциональности между функцией (2.8) и δ -функцией, вычислим площадь под резонансной кривой на рис. 2.1:

$$\int dE_f |a_f(t)|^2 = 4|H_{fi}|^2 \int \frac{dE_f}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2} \sin^2 \left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2\hbar} t \right), \quad (2.9)$$

где предполагается, что матричный элемент $|H'_{fi}|^2$ является гладкой функцией энергии E_f (по сравнению с функциями быстро меняющимися с E_f , особенно на больших t) и мало меняется внутри основного максимума резонансной кривой. Теперь, из-за резкого максимума подынтегральной функции, интегрирование может быть распространено до бесконечности. Вводя аргумент синуса в качестве новой переменной x с началом в точке резонанса, получаем

$$\int dE_f |a_f(t)|^2 = 4|H_{fi}|^2 \frac{t}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2}. \quad (2.10)$$

Так как оставшийся интеграл равен π ,

$$\int dE_f |a_f(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{fi}|^2 t. \quad (2.11)$$

Это дает правильную нормировку δ -функции и приводит снова к золотому правилу (2.5),

$$|a_f(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} t |H'_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (2.12)$$

где t является длительностью процесса и при больших t , не имеет значения, какая была начальная точка.

2.2 Выход за первый порядок

Предположим, что частота поля недостаточна для достижения конечного состояния $|f\rangle$ из заданного начального состояния $|i\rangle$. В этом случае, нам нужны следующие члены хронологически упорядоченного ряда теории возмущений. Согласно уравнению 1.24, во втором порядке имеем

$$I_{fi}(t) = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_n H'_{fn}(t') H'_{ni}(t'') e^{i\omega_{fn}t' + i\omega_{ni}t''}. \quad (2.13)$$

Для оценки этого вклада воспользуемся теми же приближениями, что и ранее. Члены второго порядка описывают передачу двух квантов внешнего поля системе. Теперь мы находимся в резонансе с конечными состояниями, которые отличаются по энергии от начального состояния на $2\hbar\omega$. Во внешнем поле H' , мы удерживаем только члены, которые приведут к резонансу при $\omega = \omega_{fi}/2$,

$$I_{fi}(t) = \sum_n H'_{fn} H'_{ni} \int_0^t dt' e^{i(\omega_{fn}-\omega)t'} \int_0^{t'} dt'' e^{i(\omega_{ni}-\omega)t''}. \quad (2.14)$$

Интегрирование по t'' дает (опять же, оставив только наиболее важный член)

$$I_{fi}(t) = \sum_n \frac{H'_{fn} H'_{ni}}{i(\omega_{ni} - \omega)} \int_0^t dt' \left[e^{i(\omega_{fi} - 2\omega)t'} - 1 \right]. \quad (2.15)$$

Используя этот результат в $a_f(t)$, переходя к пределу $t \rightarrow \infty$ и вводя подходящую δ -функцию, мы приходим к золотому правилу (2.6) с эффективным матричным элементом второго порядка

$$\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{fi}^{(2)}|^2 \delta(E_f - E_i - 2\hbar\omega), \quad H_{fi}^{(2)} = \sum_n \frac{H'_{fn} H'_{ni}}{E_n - E_i - \hbar\omega}. \quad (2.16)$$

Такие эффекты работают в лазерных приложениях когда, например, энергия $\hbar\omega$ одного кванта ниже порога ионизации, а путем добавления нескольких квантов, мы можем получить необходимое количество энергии для ионизации. Первый шаг двухступенчатого процесса должен быть виртуальным (внемассовым, нерезонансным).

Таким путём можно описать многоквантовые процессы. В частности, в третьем порядке вместе с резонансом на частоте 3ω перехода, появляется новый тип вклада $H'_{fn} H_{nl}^{\dagger} H'_{li}$ (плюс все перестановки хронологического упорядочивания). Эти члены дают снова резонанс в простейшем переходе $i \rightarrow f$ с $\omega_{fi} = \omega$. Для слабого поля, это просто малая поправка к первому порядку, хотя она становится заметной для сильных полей.

2.3 Вырожденные состояния

Решение для системы вырожденных состояний даёт периодически (но не гармонически) меняющиеся волновые функции.

Задача 2.1

Рассмотреть систему где периодическое возмущение $\hat{H}' \cos(\omega t)$ имеет большой матричный элемент между двумя вырожденными состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Найти эволюцию волновой функции со временем, если в начальный момент система находилась в состоянии $|1\rangle$.

Решение В общей системе зависящих от времени уравнений (см. уравнение 1.9), мы удерживаем только уравнения, связывающие два вырожденных уровня, $\omega_{12} = 0$:

$$i\hbar \dot{a}_1 = H'_{12} \cos(\omega t) a_2, \quad i\hbar \dot{a}_2 = H'_{12} \cos(\omega t) a_1. \quad (2.17)$$

Точное решение этой системы уравнений легко найти, если мы примем, что в согласии с нормировкой $|a_1(t)|^2 + |a_2(t)|^2 = 1$ и начальным условием $a_1(0) = 1$,

$$a_1(t) = \cos \gamma(t), \quad a_2(t) = -i \sin \gamma(t), \quad \gamma(0) = 0. \quad (2.18)$$

Тогда, два уравнения (2.17) сводятся к одному уравнению на $\gamma(t)$,

$$\hbar \dot{\gamma} = H'_{12} \cos(\omega t). \quad (2.19)$$

Интегрируя это уравнение с данным начальным условием, получаем,

$$a_1(t) = \cos\left(\frac{H'_{12}}{\hbar\omega} \sin(\omega t)\right), \quad a_2(t) = -i \sin\left(\frac{H'_{12}}{\hbar\omega} \sin(\omega t)\right). \quad (2.20)$$

Система осциллирует между двумя состояниями с максимальной заселённостью второго уровня равной $\sin^2(H'_{12}/\hbar\omega)$. Это решение также легко найти используя матрицы Паули в двумерном пространстве.

Такая ситуация имеет место в атоме водорода, где состояниях $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ являются вырожденными, см. т. 1, раздел 24.2, если пренебречь лэмбовским сдвигом. Эти состояния могут быть сильно смешаны в постоянном электрическом поле, давая новые стационарные суперпозиции. Здесь мы видим, что периодическое поле создает периодические изменения во времени комбинаций первоначально вырожденных стационарных состояний. Число линейно независимых комбинаций равно степени вырождения. Второе решение для задачи 2.1 будет соответствовать начальному условию $a_2(0) = 1$. Более общее начальное условие будет генерировать определенную линейную комбинацию $\cos \gamma(t)$ и $\sin \gamma(t)$.

Схема решения для N вырожденных состояний является прямым обобщением двухуровневой задачи: мы ищем частное решение в виде

$$a_j = A_j e^{-i\gamma(t)}; \quad (2.21)$$

$$\hbar A_j \dot{\gamma} = \cos(\omega t) \sum_{j'} A_{j'} H_{jj'}; \quad (2.22)$$

временная зависимость удовлетворяется подстановкой

$$\gamma(t) = \frac{\Lambda}{\hbar\omega} \sin(\omega t); \quad (2.23)$$

и мы приходим к статической проблеме собственных значений для Λ ,

$$\Lambda A_j = \sum_{j'} H_{jj'} A_{j'}, \quad (2.24)$$

что даёт n собственных значений Λ и , следовательно, n функций $\gamma(t)$. Правильная комбинация частных решений (2.21) должна находиться из начальных условий. При решении этой задачи, мы пренебрегаем присутствием всех других состояний в системе. Они могут быть учтены как возмущение к указанному выше решению.

2.4 Квазиэнергия

Можно провести аналогию между поведением квантовой системы в периодической пространственной решетке, см. т. 1 Раздел 8.7, и в поле с периодической зависимостью от времени. В первом случае импульс частицы не мог сохраняться из-за многократного рассеяния в периодическом потенциале. Вместо этого, волновая функция может быть охарактеризована квазиимпульсом, который определен с точностью до вектора обратной решетки. Во многих случаях полезно использовать аналогичную идею для возмущения периодического во времени.

Рассмотрим общий гамильтониан $\hat{H}(t)$, периодически меняющийся во времени с периодом T ,

$$\hat{H}(t + T) = \hat{H}(t). \quad (2.25)$$

Решение уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi(t), \quad (2.26)$$

может быть представлено, как унитарная (поскольку гамильтониан эрмитов) эволюция произвольного начального состояния,

$$\Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0), \quad \hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^{-1}(t), \quad (2.27)$$

где $\hat{U}(0) = \hat{1}$. Поскольку гамильтониан, определяющий оператор эволюции, является периодическим, можно также утверждать, что

$$\Psi(t + T) = \hat{U}(t)\Psi(T). \quad (2.28)$$

Это эквивалентно следующему

$$\Psi(t + T) = \hat{U}(t)\hat{U}(T)\Psi(0), \quad (2.29)$$

и, следовательно,

$$\hat{U}(t + T) = \hat{U}(t)\hat{U}(T). \quad (2.30)$$

Унитарный оператор эволюции за период, $\hat{U}(T)$ может быть диагонализирован, его собственные значения есть (см. т.1, раздел 6.10) комплексные числа $\exp(i\alpha_k)$ на единичной окружности. Пусть ψ_k есть набор собственных векторов $\hat{U}(T)$, так что

$$\hat{U}(T)\psi_k = e^{i\alpha_k}\psi_k. \quad (2.31)$$

Действуя обеими частями (2.30) на функцию ψ_k , мы получаем

$$\hat{U}(t+T)\psi_k = e^{i\alpha_k}\hat{U}(t)\psi_k. \quad (2.32)$$

Волновая функция, которая стартует при $t = 0$ с одной из функций ψ_k ,

$$\Psi_k(t) = \hat{U}(t)\psi_k, \quad (2.33)$$

эволюционирует особенно просто,

$$\Psi_k(t+T) = e^{i\alpha_k}\Psi_k(t), \quad (2.34)$$

приобретая только фазу α_k после каждого периода T гамильтониана.

Если бы мы имели *независящий от времени* гамильтониан, эволюция *стационарного* состояния Ψ_E с энергией E за интервал времени T давалась бы

$$\Psi_E(t+T) = e^{-(i/\hbar)ET}\Psi_E(t). \quad (2.35)$$

В присутствии нестационарного возмущения энергия не сохраняется. Однако, эволюция за период состояния (2.34) Такая же, как для стационарного состояния с энергией

$$\tilde{E} = -\frac{\hbar\alpha_k}{T} = -\frac{\hbar\omega}{2\pi}\alpha_k, \quad (2.36)$$

где $\omega = 2\pi/T$. Величина \tilde{E} называется *квазиэнергией* состояния Ψ_k . Существование состояний с определённой квазиэнергией есть математическое следствие теории Флоке, 1883 г., дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами [Chi1999]. Пример из задачи 2.1 определяет периодическую функцию отвечающую квазиэнергии $\tilde{E} = 0$. Согласно (2.34), квазиэнергии определены по *модулю* $2\pi\hbar/T = \hbar\omega$, подобно квазиимпульсу в решётке.

2.5 Конечные состояния в континууме

Для перехода $i \rightarrow f$, когда $|f\rangle$ принадлежит непрерывному спектру, мы не можем точно зафиксировать отдельное конечное состояние. Имеет смысл только вероятность перехода в *спектральный интервал* конечных состояний с энергиями от E_f до $E_f + dE_f$ или в интервал других, непрерывно меняющихся квантовых чисел.

Символически, мы обозначаем этот интервал как

$$d\nu_f = d\rho_f dE_f, \quad (2.37)$$

где $d\rho_f$ имеет смысл *плотности конечных состояний* на единичный интервал энергии. Золотое правило (2.6) будет давать теперь скорость перехода в группу близлежащих конечных состояний,

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\nu_f. \quad (2.38)$$

Если конечное состояние полностью характеризуется своей энергией, то полная скорость перехода будет даваться интегралом по энергии,

$$\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE_f |H'_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2, \quad (2.39)$$

где матричный элемент берётся на энергетической поверхности. В реальности, состояния в континууме обычно вырождены, например, по направлению конечного импульса \mathbf{p}_f . Тогда, в (2.39) мы должны добавить плотность конечных состояний,

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 d\rho_f. \quad (2.40)$$

Это стандартная форма золотого правила для переходов в континуум.

Явное выражение для $d\rho_f$ зависит от нормировки состояний в континууме; они должны быть нормированы на δ -функцию от тех непрерывных переменных, которые порождают $d\nu_f$ в (2.37). Часто бывает удобно использовать *нормировку в прямоугольной яме* большого размера, которая обсуждалась в начале курса, см. т. 1, разделы 3.7 и 3.8. Волновая функция свободной частицы с периодическими граничными условиями имеет вид

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}. \quad (2.41)$$

Нормировочный объём V - вспомогательная величина, обеспечивающая правильный подсчёт квантовых состояний в континууме; физические наблюдаемые не содержат его при правильных вычислениях. Функции (2.41) нормированы так же, как и в дискретном спектре,

$$\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \int d^3r \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (2.42)$$

В этом случае, как мы знаем, плотность конечных состояний в интервале $d^3k = dk_x dk_y dk_z = k^2 dk do$ с правильно квантованными компонентами волновых векторов в элементе телесного угла do определяется следующим образом

$$d\nu_f = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k_f = \frac{V}{(2\pi)^3} k_f^2 dk_f do. \quad (2.43)$$

Поскольку для свободного движения $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, $dE = (\hbar^2 k / m) dk$,

$$d\nu_f = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{mk_f}{\hbar^2} do dE_f, \quad (2.44)$$

и

$$d\rho_f = \frac{d\nu_f}{dE_f} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{mk_f}{\hbar^2} do = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} mp_f do. \quad (2.45)$$

Если имеется несколько частиц в конечном состоянии, то в плотность нужно включать число ячеек в фазовом пространстве, $V d^3p / (2\pi\hbar)^3$, для каждой из частиц и правильно учесть кинематические связи между ними. Результат будет зависеть от системы отсчёта, используемой в описании процесса (например лабораторной или системы центра масс). Если частицы имеют дополнительные квантовые характеристики, такие как спин или поляризация, а матричный элемент процесса не зависит от них, то плотность состояний просто умножается на их число, $(2s+1)$ для частицы со спином s или на 2 для двух поляризаций фотона. Умножение означает, что нет интерференции и для некогерентных процессов, в которых конечные состояния имеют различные значения этих дискретных квантовых чисел, мы складываем *вероятности*, а не амплитуды. Различные возможные ситуации иллюстрируются ниже примерами и соответствующими диаграммами на рисунках 2.2-2.6.

Задача 2.2

Найти плотность конечных состояний для

1. релятивистская частица в конечном состоянии;
2. эффект Комптона (см. т.1, раздел 1.3) — рис. 2.2;
3. электрон-электронное рассеяние — рис. 2.3;
4. тормозное излучение заряженной частицей в присутствии тяжёлого ядра (свободная частица не может излучать, так как невозможно удовлетворить законам сохранения энергии и импульса) — рис. 2.4;
5. рождение электрон-позитронной пары фотоном в поле ядра — рис. 2.5;
6. аннигиляция электрон-позитронной пары в два фотона — рис. 2.6.

Решение

1. Для релятивистской частицы,

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2, \quad p dp = \frac{E dE}{c^2} = \frac{p}{v} dE, \quad (2.46)$$

где

$$\mathbf{v} = \mathbf{p} \frac{c^2}{E} \quad (2.47)$$

есть скорость частицы. Отсюда,

$$d\rho_f = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p_f^2 dp_f d\omega}{dE_f} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p_f^2}{v_f} d\omega. \quad (2.48)$$

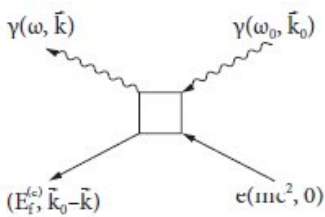


Рис. 2.2. Диаграмма для эффекта Комптона.

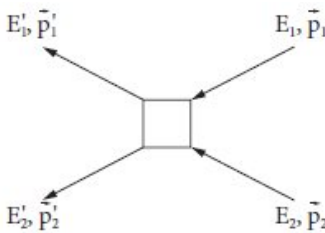


Рис. 2.3. Рассеяние электрона на электроне.

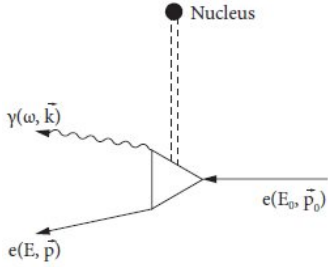


Рис. 2.4. Тормозное излучение на ядре.

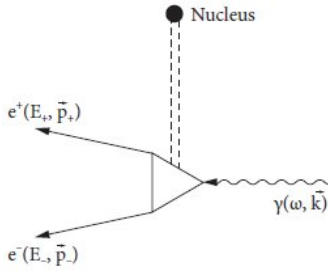


Рис. 2.5. Рождение электрон-позитронной пары фотоном в поле ядра.

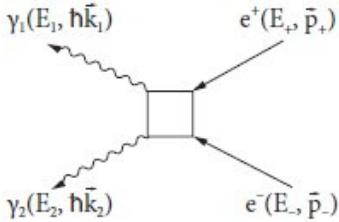


Рис. 2.6. Двух-фотонная аннигиляция электрон-позитронной пары.

При $v \ll c$, это выражение совпадает с нерелятивистским результатом (2.45), а для $m = 0$, $v = c$, $E = \hbar\omega = \hbar ck$, мы получаем плотность конечных состояний для фотона,

$$d\rho_f = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2}{\hbar c^3} d\omega. \quad (2.49)$$

- В системе отсчёта, где фотон с начальной частотой ω рассеивается на покоящейся частице массы m (электрон), частота фотона рассеянного на угол θ в элемент телесного угла $d\Omega$ равна (см. т. 1, раздел 1.3) I

$$\omega_f = \frac{\omega}{1 + (\hbar\omega/mc^2)(1 - \cos\theta)}. \quad (2.50)$$

Конечный электрон получает отдачу с энергией ε_f и импульсом p_f ,

$$E_f = \hbar\omega_f + \varepsilon_f = \hbar\omega_f + \sqrt{p_f^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (2.51)$$

Вследствие сохранения импульса, импульс начального фотона $\hbar\mathbf{k}$ удовлетворяет условию $\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}_f + \mathbf{p}_f$. Тогда,

$$E_f = \hbar\omega + \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 c^2 (k^2 + k_f^2 - 2kk_f \cos \theta)}, \quad (2.52)$$

$$\frac{dE_f}{dk_f} = \hbar c \left(1 + \frac{\hbar(\omega_f - \omega \cos \theta)}{\varepsilon_f} \right), \quad (2.53)$$

или, вспоминая о сохранении энергии,

$$\frac{dE_f}{dk_f} = \hbar c \frac{\hbar\omega(1 - \cos \theta) + mc^2}{\varepsilon_f} = \hbar c \frac{\omega_f}{\omega} \frac{mc^2}{\varepsilon_f}. \quad (2.54)$$

Окончательно,

$$d\rho_f = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{k_f^2 dk_f}{dE_f} do = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega_f}{\omega} \frac{\varepsilon_f}{mc^2} do. \quad (2.55)$$

Здесь $\varepsilon_f = \hbar(\omega - \omega_f) + mc^2$, и do - элемент телесного угла в направлении рассеянного фотона; направление \mathbf{p}_f электрона однозначно определяется законами сохранения.

3. В упругом рассеянии в системе центра масс имеем $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 \equiv \mathbf{p}$, $\mathbf{p}'_1 = -\mathbf{p}'_2 \equiv \mathbf{p}'$, и $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| \equiv p$; тогда $E_1 = E_2 = E'_1 = E'_2 \equiv E$, и достаточно следить только за одним электроном в конечном состоянии. Поскольку $E_f = 2E$, то

$$d\rho_f = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{pE}{c^2} do. \quad (2.56)$$

4. Если считать ядро бесконечно тяжёлым (пренебрегая энергией отдачи ядра $P^2/2M$), то импульс электрона не сохраняется и нужно рассматривать по отдельности импульсы испущенного фотона (частоты ω) и рассеянного электрона. Сохранение энергии даёт $E_f = E + \hbar\omega = E_0$, так что для фиксированной ω , $dE_f = dE$, и

$$d\rho_f = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{pE}{c^2} do_e \frac{V k^2 dk}{(2\pi)^3} do_\gamma. \quad (2.57)$$

5. Так же как и в случае тормозного излучения, ядро принимает на себя излишний импульс. Разница по сравнению со случаем (4) в том, что фотон теперь в начальном, а не в конечном состоянии. А вместо начального электрона мы имеем дело с конечным позитроном. Пренебрегая опять энергией отдачи ядра, имеем при фиксированной энергии позитрона E_+ , $dE_f = dE_-$, и

$$d\rho_f = d\rho_+ d\rho_- \frac{dE_+ dE_-}{dE_f} = d\rho_+ d\rho_- dE_+; \quad (2.58)$$

используя (2.48), мы получаем

$$d\rho_f = \frac{p_+ E_+}{c^2} \frac{p_- E_-}{c^2} \frac{V d\omega_+}{(2\pi\hbar)^3} \frac{V d\omega_-}{(2\pi\hbar)^3} dE_+. \quad (2.59)$$

6. В системе центра масс $\mathbf{p}_+ + \mathbf{p}_- = 0$, $E_+ = E_- = E$. Оба фотона приобретают одинаковую энергию $E_1 = E_2$, которая также равна E . Для фотонов $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0$, $|\mathbf{k}_1| = |\mathbf{k}_2| \equiv k$, $E_f = 2\hbar ck$. Это даёт

$$d\rho_f = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{2\hbar c} d\omega_1. \quad (2.60)$$

Задача 2.3

В процессе β -распада индуцированного слабыми взаимодействиями выделяется кинетическая энергия E и начальное ядро (A, Z) с Z протонами и $A - Z$ нейтронами превращается либо в ядро $A, Z + 1$ с испусканием электрона и электронного антинейтрино, либо в ядро $A, Z - 1$ с испусканием позитрона и электронного нейтрино. В пренебрежении кинетической энергией отдачи остаточного ядра и эффектами кулоновского поля ядра, Энергетический спектр испущенных электронов (или позитронов) может быть представлен как

$$dN = \text{const} |H_{fi}^{\text{weak}}|^2 g(E, E_e) dE_e. \quad (2.61)$$

Найти функцию $g(E, E_e)$

1. для безмассового нейтрино;
2. для нейтрино конечной массы m .
3. Было установлено, что электронное нейтрино ν_e , или антинейтрино $\bar{\nu}_e$, рождённые в процессе β -распада не имеют определённой массы,

будучи линейными комбинациями как минимум двух стационарных типов нейтрино с массами m_1 и m_2 ,

$$|\nu_e\rangle = \cos \vartheta |\nu_1\rangle + \sin \vartheta |\nu_2\rangle; \quad (2.62)$$

определённо известно, что эти массы не могут превышать 1 эВ, хотя их точные значения пока неизвестны. Эти *нейтринные осцилляции* будут обсуждаться позднее. Как будет выглядеть результат в этом случае?

Решение

1. В этом случае мы имеем, $E_\nu = cp_\nu = E - E_e$,

$$g(E, E_e) = (E - E_e)^2 E_e \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4}. \quad (2.63)$$

2. Модификация для конечной массы нейтрино одного сорта:

$$g(E, E_e; m) = (E - E_e) E_e \sqrt{[(E - E_e)^2 - m^2 c^4](E_e^2 - m_e^2 c^4)}. \quad (2.64)$$

3. Для случая нейтринных осцилляций,

$$g(E, E_e) = g(E, E_e; m_1) \cos^2 \vartheta + g(E, E_e; m_2) \sin^2 \vartheta. \quad (2.65)$$

Из-за малости масс m_1 и m_2 модификации могут быть заметны только в самом конце электронного спектра. Например, даже для самого обещающего случая β -распада трития, ${}^3\text{H} \rightarrow {}^3\text{He} + \text{электрон} + \text{электронное антинейтрино}$, где полная энергия выделяемая при распаде составляет 18.6 КэВ (обычно она много больше, на уровне нескольких МэВ), эта энергия всё равно много больше ожидаемых значений масс нейтрино (или антинейтрино). Такие эксперименты идут уже много лет, но окончательный результат ещё не достигнут [2].

2.6 Приближение вращающегося поля

Вернёмся к взаимодействию атомных уровней с периодическим электромагнитным полем - главной проблеме квантовой оптики. В предыдущих разделах мы видели решающую роль выполнения условия резонанса. Фактически, мы уже обсуждали это в связи с магнитным резонансом (см. т. 1, раздел 20.4) и в разделе 2.3, где речь шла о вырожденных состояниях; здесь мы рассмотрим резонансное приближение, которое будет полезно во многих практических приложениях.

В простейшей ситуации мы имеем "атом" в монохроматическом поле. Атомные состояния мы будем называть $|g\rangle$ ("основное" состояние) с невозмущённой энергией E_g и $|e\rangle$ ("возбуждённое" состояние) с энергией $E_e = E_g + \hbar\omega_0$. Внешнее поле

$$\hat{H}'(t) = \hat{V} \cos(\omega t + \alpha) \quad (2.66)$$

характеризуется своей частотой ω , которая вообще говоря отличается от ω_0 , так что имеется *расстройка*

$$\Delta = \omega_0 - \omega = \frac{E_e - E_g - \hbar\omega}{\hbar}. \quad (2.67)$$

Эрмитовское возмущение (2.66) индуцирует переходы как между состояниями $|g\rangle$ и $|e\rangle$, так и в другие атомные состояния. Мы будем предполагать, что оператор $\hat{V} = \hat{V}^\dagger$ имеет большие матричные элементы $V \equiv \langle g|\hat{V}|e\rangle = \langle e|\hat{V}|g\rangle^*$ для переходов $g \leftrightarrow e$ по сравнению с переходами в другие состояния. В квантовой оптике наиболее сильными являются дипольные переходы между состояниями противоположной чётности. В этом случае

$$\hat{V} = -(\vec{\mathcal{E}} \cdot \hat{\mathbf{d}}), \quad (2.68)$$

где $\vec{\mathcal{E}}$ - электрическое поле внешней электромагнитной волны.

Далее мы ограничимся только двумя уровнями, пренебрегая переходами в другие состояния. Это приближение связано с резонансом, который отвечает условию $\Delta = 0$. Таким образом, мы приходим к двухуровневой динамике, в которой волновая функция есть линейная комбинация состояний $|g\rangle$ и $|e\rangle$,

$$|\Psi(t)\rangle = a_g(t)|g\rangle + a_e(t)|e\rangle, \quad (2.69)$$

и амплитуды $a_g(t)$ и $a_e(t)$ удовлетворяют системе дифференциальных уравнений

$$i\hbar\dot{a}_g = E_g a_g + V(t)a_e, \quad i\hbar\dot{a}_e = E_e a_e + V^*(t)a_g. \quad (2.70)$$

Здесь мы используем произвольную зависимость от времени $V(t)$ описывающую форму импульса поля.

Во многих проблемах взаимодействия излучения с материей, когда рассматривается только пара атомных состояний связанных сильными радиационными переходами, то удобно отобразить эти состояния на систему

спина $1/2$ (на современном языке это *кубит* - элементарная ячейка будущих квантовых компьютеров), см. т. 1, раздел 20.7. Состояние с ориентацией спина вверх или вниз отвечает соответственно большей или меньшей энергии, так что гамильтониан свободного атома есть

$$\hat{H}_{\text{at}}^{\circ} = \begin{pmatrix} E_e & 0 \\ 0 & E_g \end{pmatrix} = \frac{E_g + E_e}{2} \hat{1} + \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z. \quad (2.71)$$

Повышающий оператор $s_+ = (1/2)(\sigma_x + i\sigma_y)$ описывает поглощение резонансного кванта, в то время как понижающий оператор $s_- = (1/2)(\sigma_x - i\sigma_y)$ описывает излучение. Волновая функция изображается спинором,

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a_e|e\rangle \\ a_g|g\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

а полный гамильтониан даётся матрицей 2×2 ,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_e & V^*(t) \\ V(t) & E_g \end{pmatrix} = \frac{E_g + E_e}{2} \hat{1} + \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z + \text{Re}(V(t))\sigma_x + \text{Im}(V(t))\sigma_y. \quad (2.73)$$

Выделяя невозмущённую зависимость от времени мы приходим к представлению взаимодействия для новых амплитуд,

$$a_g(t) = e^{-(i/\hbar)E_g t} b_g(t), \quad a_e(t) = e^{-(i/\hbar)E_e t} b_e(t), \quad (2.74)$$

которые удовлетворяют системе уравнений

$$i\hbar \dot{b}_g = V(t)e^{-i\omega_0 t} b_e(t), \quad i\hbar \dot{b}_e = V^*(t)e^{i\omega_0 t} b_g(t). \quad (2.75)$$

Во многих случаях проблему можно заметно упростить используя резонанс, так называемое приближение *вращающегося поля*. Монохроматическое поле (2.68) может быть представлено как

$$\hat{H}'(t) = \frac{1}{2} \hat{V} [e^{i(\omega t + \alpha)} + e^{-i(\omega t + \alpha)}], \quad (2.76)$$

полагая V действительным, а его фаза включена в α . Если расстройка мала, $\Delta \ll \omega_0$, в первом уравнении (2.75) первая экспонента из (2.76) почти сокращает исходную временную зависимость $\exp(-i\omega_0 t)$, оставляя только медленно меняющуюся во времени экспоненту. В теории возмущений этот член будет порождать малый энергетический знаменатель и, следовательно,

большую вероятность перехода, как в случае резонансного члена в (2.7). Вторая экспонента быстро осциллирует и даёт нерезонансный вклад. В приближении вращающегося поля такими членами пренебрегают. Таким образом, мы оставляем только первую экспоненту из (2.76) в первом уравнении (2.75) и вторую экспоненту во втором уравнении. Система связанных уравнений в приближении вращающегося поля принимает вид

$$i\hbar\dot{b}_g = \frac{1}{2} V e^{-i(\Delta t + \alpha)} b_e(t), \quad i\hbar\dot{b}_e = \frac{1}{2} V e^{i(\Delta t + \alpha)} b_g(t). \quad (2.77)$$

Это приближение справедливо, если решение действительно содержит только плавную зависимость от времени.

Задача 2.4

Найти общее решение двухуровневой задачи в приближении вращающегося поля.

Решение В действительности, эквивалентную проблему мы уже решали для магнитного резонанса, см. т. 2, раздел 5.4. Имеются два независимых решения,

$$\Psi_{-}(t) = \begin{pmatrix} b_e(t) \\ b_g(t) \end{pmatrix}_{+} = \begin{pmatrix} -e^{i\alpha} A_{-} e^{i(\Omega + \Delta/2)t} \\ A_{+} e^{i(\Omega - \Delta/2)t} \end{pmatrix} \quad (2.78)$$

и

$$\Psi_{+}(t) = \begin{pmatrix} b_e(t) \\ b_g(t) \end{pmatrix}_{-} = \begin{pmatrix} A_{+} e^{i(-\Omega + \Delta/2)t} \\ e^{-i\alpha} A_{-} e^{-i(\Omega + \Delta/2)t} \end{pmatrix}. \quad (2.79)$$

Здесь мы положили $\Delta > 0$ и ввели *частоту Раби*

$$\Omega = \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2 + \frac{V^2}{\hbar^2}}, \quad (2.80)$$

в которую входит расстройка внешнего поля и расщепление V^2 , как это всегда происходит в двухуровневой проблеме. Оба члена в уравнении для Ω должны быть много меньше ω_0 , чтобы резонансное приближение было справедливо. Это значит, что поле волны, которое входит в V , должно быть много слабее электрического поля в атоме. При этом, соотношение между Δ и V может быть произвольным. Амплитуды A_{\pm} равны

$$\sqrt{2}A_{\pm} = \sqrt{1 \pm \frac{\Delta}{2\Omega}}. \quad (2.81)$$

В действительности, система уравнений даёт только линейную связь между A_+ и A_- ; в (2.78) и (2.79) они выбраны так, чтобы для не связанных с полем состояний ($V \rightarrow 0$, $\Omega = \Delta/2$),

$$\Psi_- \rightarrow \Psi_e = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_+ \rightarrow \Psi_g = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.82)$$

Общее решение с произвольными начальными условиями даётся суперпозицией

$$\Psi = C_- \Psi_- + C_+ \Psi_+. \quad (2.83)$$

Не следует забывать, что это получено в представлении взаимодействия и что полная зависимость от времени даётся переходом назад к амплитудам $a_e(t)$ и $a_g(t)$ согласно (2.74).

Выделяя полную зависимость от времени в амплитудах $a(t)$, мы видим, что имеются четыре квазиэнергии, которые в порядке возрастания равны

$$\begin{aligned} \tilde{E}_g^{(-)} &= E_g + \hbar \left(\frac{\Delta}{2} - \Omega \right), \\ \tilde{E}_g^{(+)} &= E_g + \hbar \left(\frac{\Delta}{2} + \Omega \right), \\ \tilde{E}_e^{(-)} &= E_e - \hbar \left(\frac{\Delta}{2} + \Omega \right), \\ \tilde{E}_e^{(+)} &= E_e - \hbar \left(\frac{\Delta}{2} - \Omega \right). \end{aligned} \quad (2.84)$$

Здесь имеется попарное соответствие,

$$\tilde{E}_e^{(+)} - \tilde{E}_g^{(+)} = \tilde{E}_e^{(-)} - \tilde{E}_g^{(-)} = \hbar(\omega_0 - \Delta) = \hbar\omega. \quad (2.85)$$

Вернее состояние в каждой паре можно интерпретировать как нижнее состояние плюс квант внешнего поля.

2.7 Взаимодействие с квантованным полем

Рассмотрим теперь модель *Джейнса-Каммингса* [3,4], где внешнее монохроматическое поле представлено квантовым гармоническим осциллятором. Квантование поля детально будет обсуждаться в главе 4. Здесь мы нуждаемся только в идее фотонов, как квантов с энергией $\hbar\omega$, которые могут испускаться или поглощаться системами атомов. Моделируя поле гармоническими квантами с возможными n -квантовыми состояниями $|n\rangle$ мы сможем продвинуться к рассмотрению многофотонных процессов.

В рамках двухуровневой системы во внешнем поле с малой расстройкой Δ мы имеем такие *резонансные* процессы: поглощение кванта, когда поле теряет один квант, $|n\rangle \rightarrow |n-1\rangle$, в то время как атом возбуждается, $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$, и индуцированное излучение, которое отвечает переходам $|n\rangle \rightarrow |n+1\rangle$, $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$. Индуцированные процессы генерируют фотон с теми же квантовыми числами, что и квант поля, до тех пор пока мы игнорируем некогерентное спонтанное излучение. Гамильтониан даётся спинорной моделью (2.73), в которой внешнее поле представлено гармоническим осциллятором,

$$\hat{H} = \frac{E_g + E_e}{2} \hat{I} + \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z + \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + H'. \quad (2.86)$$

Резонансная часть гамильтониана взаимодействия может быть записана как

$$\hat{H}' = V \sigma_+ \hat{a} + V^* \sigma_- \hat{a}^\dagger, \quad (2.87)$$

где повышающие и понижающие спиновые операторы $\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$ имеют матричные элементы

$$\langle e | \sigma_+ | g \rangle = \langle g | \sigma_- | e \rangle = 1. \quad (2.88)$$

Заметим, что здесь нет никакой явной зависимости от времени, поскольку квантованное электромагнитное поле не есть внешний объект с заданной временной зависимостью; теперь оно включено в степени свободы всей системы.

Полное гильбертово пространство генерируется базисными состояниями $|g; n\rangle$ и $|e; n\rangle$ которые характеризуются атомным уровнем и целым числом $n = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ квантов. Кроме полной энергии имеется другой очевидный интеграл движения - полное число квантов, если приписать системе в возбуждённом состоянии один квант. По этой причине, только два состояния для каждого $n > 0$ связаны резонансным гамильтонианом, $|g; n\rangle$ и $|e; n-1\rangle$. Основное состояние $|g; 0\rangle$ (отсутствие квантов поля) является стабильным. Но, начиная с $|g; n > 0\rangle$, мы получаем двухуровневую динамику с волновой функцией

$$|\Psi^{(n)}\rangle = \begin{pmatrix} a_e^{(n)}(t) |e; n-1\rangle \\ a_g^{(n)}(t) |g; n\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.89)$$

Предполагая, что начальное состояние было суперпозицией многофотонных состояний с атомом в основном состоянии,

$$|\Psi(0)\rangle = \left(\sum_n \xi_n |g; n\rangle \right), \quad (2.90)$$

найти волновую функцию при $t > 0$.

Решение В каждом двумерном секторе (2.89) удобно использовать представление взаимодействия, выделяя тривиальную невозмущённую динамику,

$$a_{e,g}^{(n)}(t) = e^{-(i/\hbar)[(E_g + E_e)/2 + \hbar\omega_n]t} b_{e,g}^{(n)}(t). \quad (2.91)$$

Новые амплитуды $b_{e,g}^{(n)}(t)$ удовлетворяют уравнению

$$i\dot{b}_e^{(n)} = \frac{\Delta}{2} b_e^{(n)} + \lambda_n b_g^{(n)}, \quad i\dot{b}_g^{(n)} = -\frac{\Delta}{2} b_g^{(n)} + \lambda_n^* b_e^{(n)}, \quad (2.92)$$

где мы учли матричные элементы гармонического осциллятора (см. т. 1, уравнение 11.119) и ввели расстройку Δ и зависящий от n параметр связи $\lambda_n = (2V/\hbar)\sqrt{n}$. Эта система уравнений может быть решена так же, как и раньше, и для начального условия (2.90) мы получаем,

$$b_g^{(n)}(t) = \xi_n \left\{ \cos\left(\frac{\Omega_n t}{2}\right) + i \frac{\Delta}{\Omega_n} \sin\left(\frac{\Omega_n t}{2}\right) \right\}, \quad (2.93)$$

$$b_e^{(n)}(t) = -\xi_n \frac{\lambda_n}{\Omega_n} \sin\left(\frac{\Omega_n t}{2}\right), \quad (2.94)$$

где частота Раби Ω_n зависит теперь не от амплитуды электрического поля, как в (2.80) или от магнитного поля, как в Т. 1, уравнение 20.54, а от n (интенсивности квантованного поля),

$$\Omega_n = \sqrt{\Delta^2 + |\lambda_n|^2}. \quad (2.95)$$

Осциллирующая зависимость амплитуд волновой функции от времени порождает явление *возрождения* первоначального многофотонного волнового пакета, рис. 2.7, характеризуемого коэффициентами ξ_n суперпозиции (2.90). Например, предположим, что мы работаем точно в резонансе, $\Delta = 0$.

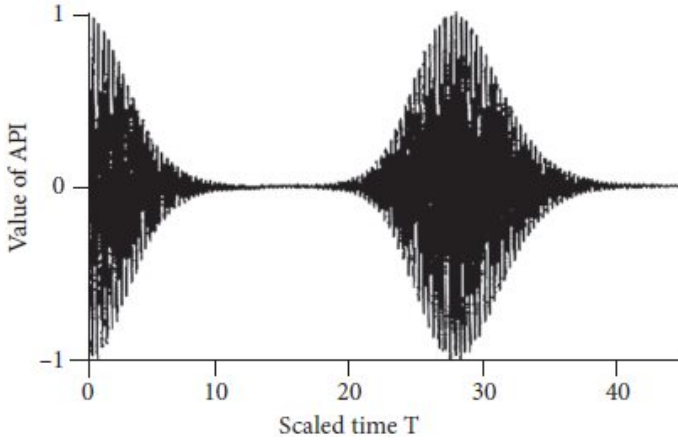


Рис. 2.7. Эволюция начального когерентного состояния в модели Джейнса-Каммингса [5]; вертикальная ось показывает инверсную заселённость атома как функцию безразмерного времени $T = Vt$.

Зависящая от времени вероятность найти атом в основном состоянии даётся выражением

$$P_g(t) = \sum_n |b_g^{(n)}(t)|^2 = \sum_n |\xi_n|^2 \cos^2 \frac{|\lambda_n|t}{2}, \quad (2.96)$$

или, используя нормировку в (2.90), $\sum_n |\xi_n|^2 = 1$,

$$P_g(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sum_n |\xi_n|^2 \cos \left(\frac{2|V|\sqrt{n}t}{\hbar} \right). \quad (2.97)$$

После старта фотонный пакет проходит быструю стадию декогерентности ("коллапс"). Можно оценить время возрождения. Если фотонный волновой пакет имеет максимум при среднем числе фотонов \bar{n} и с типичной шириной $(\Delta n) \ll \bar{n}$, то можно ожидать, что максимум ряда Фурье (2.97) при $t = T$, будет достигаться тогда, когда компоненты соседние с максимальной будут находиться в фазе,

$$\frac{d}{dn} \left(\frac{2|V|\sqrt{n}T}{\hbar} \right)_{n=\bar{n}} = \frac{|V|T}{\hbar\sqrt{\bar{n}}} = 2\pi. \quad (2.98)$$

Это определяет время возрождения

$$T = 2\pi \frac{\hbar}{|V|} \sqrt{\bar{n}} = \frac{4\pi\bar{n}}{\Omega_{\bar{n}}}. \quad (2.99)$$

Задача 2.6

Предполагая многофотонный пакет гауссовым с большим средним числом фотонов $\bar{n} \gg 1$ и $(\Delta n) = \sqrt{\bar{n}}$, найти эволюцию гауссового волнового пакета на малых временах (до начала возрождения). Эти начальные условия соответствуют квазиклассическому когерентному состоянию, см. т. 1, раздел 12.6, рассматриваемому вблизи максимума волнового пакета.

Решение В этом случае,

$$|\xi_n|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{n}}} e^{-(n-\bar{n})^2/2\bar{n}}. \quad (2.100)$$

Подставив это в (2.97), и заменив суммирование по n , \sum_n , интегрированием $\int dn$, а также распространив интегрирование до $-\infty$, получаем, вычислив гауссов интеграл,

$$P_g(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2|V|\sqrt{\bar{n}}t}{\hbar}\right) e^{-|V|^2 t^2/2}. \quad (2.101)$$

Это уравнение описывает стадию начала коллапса (быстрая декогерентность). В этом приближении возрождение не описывается.

2.8 Одетые состояния

Когда мы включаем, как в (2.86), электромагнитное поле в нашу систему, полный гамильтониан не зависит от времени. Поэтому, можно говорить о стационарных состояниях системы в целом, атом + поле. Такие *одетые состояния* возникают в сильных полях, когда теория возмущений неприменима.

Мы рассмотрим только простейший случай двухуровневого атома и частоты поля близкой к резонансу. Сильное поле может рассматриваться классически, так что в приближении вращающегося поля гамильтониан в *представлении взаимодействия* может быть опять записан с помощью матриц Паули для атомных состояний как

$$\hat{H} = \frac{\hbar\Delta}{2} \sigma_z - \frac{1}{2} (V\sigma_+ + V^*\sigma_-). \quad (2.102)$$

Это стандартная двухуровневая задача, с которой мы встречались много раз. Эффективное двумерное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}|\pm\rangle = E_{\pm}|\pm\rangle, \quad (2.103)$$

даёт два стационарных состояния $|\pm\rangle$ с новыми энергиями E_{\pm} .

Задача 2.7

Найти энергии E_{\pm} и соответствующие стационарные состояния $|\pm\rangle$.

Решение Стационарные энергии прямо связаны с частотой Раби,

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \Omega \equiv \pm \frac{1}{2} \sqrt{\hbar^2 \Delta^2 + |V|^2}, \quad (2.104)$$

и состояния раздвинуты по энергии на частоту Раби. Волновые функции даются

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\Omega}} \begin{pmatrix} \sqrt{\Omega - \Delta} \\ -V^*/\sqrt{\Omega - \Delta} \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\Omega}} \begin{pmatrix} V/\sqrt{\Omega - \Delta} \\ \sqrt{\Omega - \Delta} \end{pmatrix}. \quad (2.105)$$

Если два атомных уровня, связанные сильным лазерным полем, могут испускать фотоэлектроны, то в спектре электронов будет наблюдаться *удвоение резонансов* с расстоянием $\hbar\Omega$ между пиками. Подобная пара когерентно связанных состояний появляется и в квантовом рассмотрении полей. В модели Джейнса-Каммингса мы будем иметь полностью аналогичную пару одетых состояний *для каждого числа фотонов* $n \geq 1$, с расщеплением растущим как \sqrt{n} , рис. 2.8.

2.9 Сверхизлучение

Как пример физического явления возможного при взаимодействии *интенсивной* электромагнитной волны с материей, мы обсудим явление сверхизлучения или, если говорить точно *когерентное спонтанное излучение*, предсказанное Р. Дикке [6]. Это предсказание нетривиально, поскольку из элементарной теории излучения известно, что спонтанное излучение некогерентный процесс. Однако, могут существовать возбуждённые состояния системы N -атомов, в которых интенсивность излучения в N^2 раз больше, чем у индивидуального атома. Ниже мы дадим упрощённое объяснение этого эффекта.

Возвращаясь к спинорному описанию двухуровневого атома, обозначим энергии возбуждённого и основного состояния как $\pm E/2$, так что гамильтониан (2.71) свободного атома есть

$$\hat{H}_{\text{at}}^0 = E \hat{s}_z. \quad (2.106)$$

Амплитуды A^* и A поглощения и излучения резонансного фотона комплексно сопряжены и $I_0 = |A|^2$ есть мера интенсивности спонтанного излучения

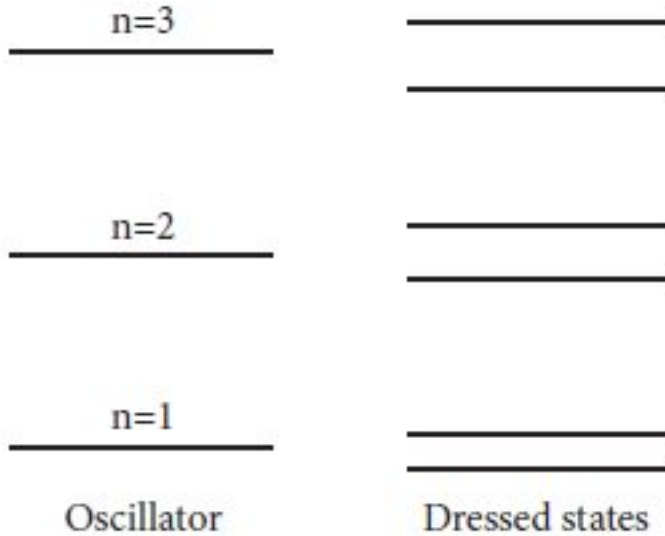


Рис. 2.8. Схема расщепления одетых состояний при взаимодействии двухуровневой системы с квантовым гармоническим осциллятором.

одинокго атома при его переходе вниз. Поместим N тождественных атомов в объём, стенки которого прозрачны для излучения резонансной частоты. Размер объёма выберем так, чтобы он был много меньше длины волны λ обсуждаемого перехода $kr_a \ll 1$, и пренебрежём всеми разностями фаз из-за различия расстояний проходимых волнами от разных излучателей. Будем также пренебрегать прямыми взаимодействиями между атомами и перекрытием пространственных волновых функций различных атомов. Если все атомы возбуждены и излучают независимо, то полная интенсивность $I \sim NI_0$. Тем не менее, даже в отсутствие прямой связи между атомами возможно когерентное излучение с $I \sim N^2 I_0$.

Если векторный оператор спина-кубита $\mathbf{s}(a)$ действует в двухуровневом пространстве атома a , можно определить полный "спин" или *квазиспин* системы как

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_{a=1}^N \hat{\mathbf{s}}(a). \quad (2.107)$$

Базис невзаимодействующих спинов состоит из 2^N конфигураций с различным распределением возбуждённых спинов. Обозначим заселённости двух атомных уровней через $N_{\pm} = (N/2) + M$, где $N = N_+ + N_-$ - полное число

атомов, а $M = S_z = (N_+ - N_-)/2$ - проекция полного спина (сравните со швингеровским представлением углового момента, т. 2, глава 7). Базис независимых спинов не слишком удобен для описания процессов излучения, которые фактически дают связь с континуумом. Эта связь описывается оператором

$$\hat{H}' = A^* \sum_a \hat{s}_+(a) + A \sum_a \hat{s}_-(a) \equiv A^* \hat{S}_+ + A \hat{S}_-, \quad (2.108)$$

где все амплитуды A_a одинаковы в нашем длинноволновом пределе, так что в (2.108), как и в структуру внутреннего гамильтониана $\hat{H}^0 = E \hat{S}_z$, входят компоненты полного спина. Квазиспин \mathbf{S} в классическом пределе называется *вектором Блоха*; в приближении (2.108) его величина S сохраняется. Таким образом, вся динамика вектора Блоха разворачивается на поверхности сферы. Полный гамильтониан, включающий связь с континуумом (2.108) диагонализуется в базисе полного спина S и проекции M .

Задача 2.8

Вычислить число состояний $g(M)$ с заданной степенью возбуждения, даваемой полной проекцией M и число $\mathcal{N}(S)$ мультиплетов со спином S .

Решение

$$g(M) = \frac{N!}{(N/2 + M)!(N/2 - M)!}, \quad (2.109)$$

$$\mathcal{N}(S) = g(M = S) - g(M = S + 1). \quad (2.110)$$

При $M = N/2$, все атомы возбуждены, состояние единственное (максимальная проекция вектора Блоха на ось z), $g(N/2) = 1$, это возможно только для $S = N/2$. Следующая проекция, $M = N/2 - 1$, может быть построена $g(N/2 - 1) = N$ способами переворотом одного из спинов. Одна комбинация из этих N состояний принадлежит тому же максимальному спину $S = N/2$. Это симметричная линейная комбинация с одинаковыми амплитудами переворота для всех спинов, которая может быть получена действием коллективного понижающего оператора S_- ; другие $N - 1$ комбинаций состояний с одним перевёрнутым спином принадлежат новым мультиплетам с полным спином $S = N/2 - 1$.

В процессе однофотонного излучения, описываемого гамильтонианом (2.108), сохраняется длина S вектора Блоха, но меняется его ориентация,

$|SM\rangle \rightarrow |SM-1\rangle$. В этом случае излучение не может быть отнесено к отдельному атому, мы имеем коллективный процесс излучения всей *запутанной* системой. Амплитуда излучения пропорциональна

$$A\langle SM-1|S_-|SM\rangle = A\sqrt{(S+M)(S-M+1)}. \quad (2.111)$$

Для одного атома, $S = 1/2$, $M = 1/2$, этот матричный элемент равен A ; для многих тождественных атомов интенсивность излучения (2.111) равна

$$I = I_0(S+M)(S-M+1), \quad (2.112)$$

Если мы начинаем с выстроенного состояния $S = M = N/2$, то мы можем иметь только некогерентное излучение, $I = I_0N$. Для состояний с одним перевёрнутым спином, $M = N/2 - 1$, когерентная часть даёт $I = 2(N-1)I_0$, в то время как остающиеся некогерентные комбинации дают $I = (N-2)I_0$. Ясно, что по мере убывания M при перевороте большего числа спинов, интенсивность излучения испускаемого коллективной суперпозицией с максимальным спином $S = N/2$ возрастает.

Механизм усиления объясняется связью индивидуальных спинов через континуум. Виртуальное излучение спином a и поглощение его спином b создаёт когерентное *супер-излучающее* состояние. При этом не требуется прямого спин-спинового взаимодействия. В состоянии с максимально ориентированным спином вдоль оси z возможно только некогерентное излучение. Связь через виртуальный континуум максимальна в ситуации, когда половина спинов смотрит вверх, а половина вниз. Это происходит (для чётных N) при поперечной ориентации вектор Блоха, $S = N/2$, $M = 0$, тогда

$$I = I_0 \frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \approx \frac{I_0}{4} N^2, \quad (2.113)$$

интенсивность при больших N пропорциональна N^2 . Состояния с $M < 0$ опять менее выгодны для излучения.

Задача 2.9

Классическая аналогия с вращающимся дипольным излучателем здесь вполне уместна. Если мы начинаем с вектора Блоха \mathbf{S} ориентированного вдоль оси z , то эта ситуация подобна неустойчивому равновесию маятника смотрящего вертикально вверх, $M = S$. Начинаящееся спонтанное излучение заставляет маятник двигаться вниз уменьшая $M = S \cos \theta$. Используя баланс внутренней энергии и интенсивности излучения запишите классическое уравнение движения вектора Блоха как функции времени и решите это уравнение.

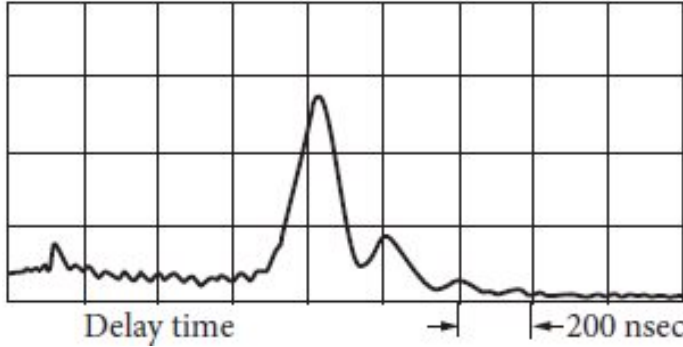


Рис. 2.9. Развитие во времени супер-излучательного импульса в переходе между вращательными уровнями $J = 3 \rightarrow J = 2$ молекулы HF [7], длина волны $84 \mu\text{m}$.

Решение Зависящая от времени интенсивность излучения (2.112) диполя

$$I \approx I_0(S^2 - M^2) = I_0 S^2 \sin^2 \theta, \quad (2.114)$$

достигает максимума при поперечной ориентации, $\theta = \pi/2$. Интенсивность равна скорости потери внутренней энергии $\dot{H}^\circ = EM$,

$$I = -\dot{H}^\circ = -E\dot{M} = ES \sin \theta \cdot \dot{\theta}. \quad (2.115)$$

Поэтому, уравнение движения для вектора Блоха имеет вид

$$\dot{\theta} = \frac{I_0 S}{E} \sin \theta; \quad (2.116)$$

интенсивность (2.115) достигает максимума при $\theta = \pi/2$. Угол меняется как

$$\tan \frac{\theta}{2} = e^{(I_0 S/E)(t-t_0)} \tan \frac{\theta_0}{2}. \quad (2.117)$$

Многочисленные эксперименты в квантовой оптике подтвердили механизм супер-излучения Дикке. Понятно, что полная теория эффекта гораздо сложнее, поскольку должны быть учтены эффекты плотности, а также другие многочисленные факторы порождающие некогерентные эффекты. В качестве примера мы показываем на рис. 2.9 одно из первых исследований [7] эффекта оптически накачанного газа HF. "Запаздывающая" стадия некогерентного излучения сопровождается супер-излучающим пиком.

Теряется то, что передаётся другим.

Плиний Старший, *Естественная история*

Глава 3

Рассеяние быстрых заряженных частиц

3.1 Сечение рассеяния

В этом разделе результаты теории возмущений зависящих от времени будут использованы при обсуждении важной проблемы взаимодействия пучка быстрых частиц с системой конечного объёма (атом, молекула, ядро).

Падающий волновой пакет отклоняется от первоначального направления в результате *рассеяния*. Система (*рассеиватель, мишень*) после взаимодействия может остаться в своём первоначальном состоянии (*упругое рассеяние*). В этом случае, в системе центра масс процесс сводится к повороту относительного импульса мишени и налетающей частицы; кинетическая энергия относительного движения сохраняется, хотя некоторые внутренние квантовые числа взаимодействующих систем, например ориентация спина, могут измениться, если эти состояния вырождены. В процессе *неупругого рассеяния* внутренние состояния меняются вместе с кинетической энергией относительного движения. Если падающая частица и мишень были в своих основных состояниях до рассеяния, то они могут возбуждаться. энергия возбуждения берётся из относительного движения и кинетическая энергия относительного движения уменьшается.

Рассмотрим упрощённую нерелятивистскую проблему, когда налетающая точечная частица (координата \mathbf{r}) взаимодействует с системой частиц (координаты \mathbf{r}_a) через потенциал, так что возмущение имеет вид

$$\hat{H}' = \sum_a U_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a). \quad (3.1)$$

Интуитивно мы ожидаем, что для достаточно быстрых частиц (со скоростью больше, чем характерные скорости частиц в мишени) эффективное время взаимодействия будет малым, многократные процессы маловероятны

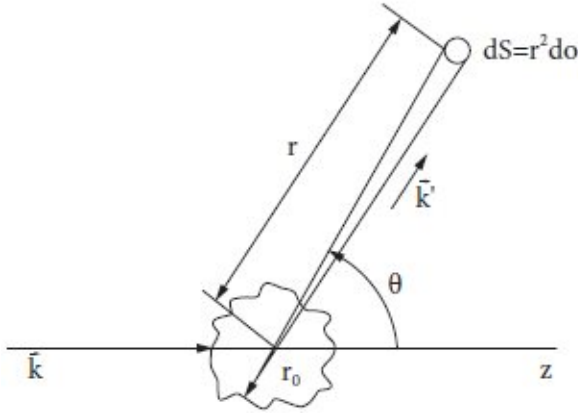


Рис. 3.1. Диаграмма рассеяния.

и полная вероятность рассеяния будет невелика. По этой причине мы будем использовать золотое правило теории возмущений в виде, приведённом в разделе 2.1.

Зависящая от времени сила, действующая со стороны системы на налетающую частицу, может быть разложена, как функция времени, в ряд Фурье. Каждая фурье-компонента частоты ω порождает соответствующий обмен энергией $\hbar\omega$ между мишенью и налетающей частицей. В пределе больших t энергия сохраняется: если ε_i и ε_f энергии соответственно начального и конечного состояний падающей частицы, а E_i и E_f энергии мишени, то сохранение энергии даёт

$$\varepsilon_f - \varepsilon_i = \hbar\omega = -(E_f - E_i). \quad (3.2)$$

Пусть мишень первоначально находится в состоянии $|i\rangle$, а падающая частица имеет импульс \mathbf{p} (процесс рассматривается в системе центра масс, поэтому все импульсы описывают относительное движение). Нас интересует вероятность $d\dot{w}_{fi}$ найти рассеянный волновой пакет с импульсом \mathbf{p}' в элементе телесного угла do , а систему в конечном состоянии $|f\rangle$. Если состояние $|f\rangle$ принадлежит дискретному спектру, то плотность конечных состояний определяется правилами раздела 2.5 для налетающей частицы. Согласно золотому правилу вероятность перехода в единицу времени есть

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(\varepsilon_i + E_i - \varepsilon_f - E_f) \frac{V d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (3.3)$$

Для нерелятивистской налетающей частицы, вводя плотность конечных состояний и интегрируя по ε_f , получаем для вероятности перехода в единицу времени $d\dot{w}_{fi}$ (m - приведённая масса)

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{V p' m}{4\pi^2 \hbar^4} |H'_{fi}|^2 do. \quad (3.4)$$

Сама по себе вероятность перехода в единицу времени не годится для сравнения с экспериментальными данными - она зависит от нормировки в непрерывном спектре. Наблюдаемой величиной является эффективное *дифференциальное сечение рассеяния* - отношение числа частиц, попадающих в единицу времени в расположенный под определённым углом детектор, к плотности падающего потока. Если падающий пучок приносит N частиц в секунду, то скорость счёта детектора будет $N d\dot{w}_{fi}$. Плотность падающего потока равна произведению плотности пучка на относительную скорость, $j = (N/V)v = (N/V)p/m$. В этом случае дифференциальное сечение равно

$$d\sigma_{fi} = \frac{N d\dot{w}_{fi}}{(N/V)(p/m)} = V \frac{m}{p} d\dot{w}_{fi}, \quad (3.5)$$

и из-за (3.4),

$$d\sigma_{fi} = V^2 \frac{p'}{p} \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |H'_{fi}|^2 do. \quad (3.6)$$

Фактор V^2 в действительности сокращается в сечении (3.6), так как волновые функции падающей частицы в континууме нормированы на тот же объём. Матричный элемент амплитуды перехода зависит от переменных как мишени, так и падающей частицы,

$$H'_{fi} = \langle f; \mathbf{p}' | \hat{H}' | i; \mathbf{p} \rangle. \quad (3.7)$$

Используя для падающей частицы плоские волны $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ нормированные на объём, находим

$$H'_{fi} = \int d^3r \psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \langle f | \hat{H}'(\mathbf{r}) | i \rangle \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \int d^3r e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} \langle f | \hat{H}'(\mathbf{r}) | i \rangle, \quad (3.8)$$

где $\langle f | \hat{H}'(\mathbf{r}) | i \rangle$ - матричный элемент взаимодействия (3.1) по состояниям мишени, который всё ещё зависит от координаты \mathbf{r} налетающей частицы. Сечение характеризует *элементарный акт* взаимодействия независимо от интенсивности пучка или нормировки на бесконечности. *Полное сечение*

$$\sigma_{fi} = \int do \frac{d\sigma_{fi}}{do} \quad (3.9)$$

получается интегрированием по всем углам рассеяния.

Вектор

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (3.10)$$

определяет *передаваемый импульс* системы к налетающей частице. Матричный элемент (3.8) есть фурье компонента амплитуды перехода $\langle f | \hat{H}'(\mathbf{r}) | i \rangle$ с соответствующим волновым вектором \mathbf{q} ,

$$(H'_{fi})_{\mathbf{q}} = \frac{1}{V} \int d^3r e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})} \langle f | \hat{H}'(\mathbf{r}) | i \rangle, \quad (3.11)$$

и окончательное выражение для сечения (3.6) имеет вид

$$d\sigma_{fi} = \frac{p'}{p} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int d^3r e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})} \langle f | \hat{H}'(\mathbf{r}) | i \rangle \right|^2 d\Omega, \quad (3.12)$$

где зависимость от нормировочного объёма V уже отсутствует.

3.2 Резефордовское рассеяние

В случае потенциального взаимодействия (3.1), матричный элемент в (3.12) может быть записан как

$$\int d^3r e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})} \langle f | \hat{H}'(\mathbf{r}) | i \rangle = \sum_a \langle f | e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a)} (U_a)_{\mathbf{q}} | i \rangle, \quad (3.13)$$

где введены фурье-компоненты потенциалов взаимодействия (мы используем переменную $\mathbf{x} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_a$),

$$(U_a)_{\mathbf{q}} = \int d^3x e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})} U_a(\mathbf{x}). \quad (3.14)$$

Для кулоновского взаимодействия между нерелятивистской падающей частицей (заряда e_0) и частицей a в системе (заряд e_a),

$$U_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) = e_0 \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) = \frac{e_0 e_a}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|}, \quad (3.15)$$

фурье-образ легко вычисляется используя уравнение Пуассона связывающего электростатический потенциал с плотностью заряда ρ^{ch} создающего этот потенциал,

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{x}) = -4\pi \rho^{\text{ch}}(\mathbf{x}). \quad (3.16)$$

Переходя к фурье-компонентам находим

$$\varphi_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi}{q^2} \rho_{\mathbf{q}}^{\text{ch}}. \quad (3.17)$$

В случае точечного заряда e_a ,

$$\rho^{\text{ch}}(\mathbf{r}) = e_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \rightsquigarrow \rho_{\mathbf{q}}^{\text{ch}} = e_a e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)}, \quad (3.18)$$

и матричный элемент (3.13) становится

$$\frac{4\pi e_0}{q^2} \langle f | \sum_a e_a e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)} | i \rangle \equiv \frac{4\pi Z e_0 e}{q^2} F_{fi}(\mathbf{q}), \quad (3.19)$$

где Ze - полный заряд мишени,

$$Ze = \int d^3r \rho^{\text{ch}}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{q}=0}^{\text{ch}} = \sum_a e_a, \quad (3.20)$$

и введён *зарядовый формфактор*

$$F_{fi}(\mathbf{q}) = \frac{1}{Ze} \langle f | \rho_{\mathbf{q}}^{\text{ch}} | i \rangle = \frac{1}{Ze} \langle f | \sum_a e_a e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)} | i \rangle. \quad (3.21)$$

собирая все уравнения, мы приходим к дифференциальному сечению для мишени испытывающей переход $i \rightarrow f$ и частицы попадающей в телесный угол do в результате кулоновского взаимодействия,

$$d\sigma_{fi} = \frac{p'}{p} \left(\frac{2mZe_0e}{\hbar^2 q^2} \right)^2 |F_{fi}(\mathbf{q})|^2 do. \quad (3.22)$$

Рассмотрим сначала *упругое рассеяние*, $p' = p$, $f = i$, $F_{fi} \equiv F$. В этом случае квадрат переданного импульса равен

$$\mathbf{q}^2 = (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (3.23)$$

где θ - угол рассеяния между начальным и конечным относительными импульсами. В кулоновском случае результат даётся

$$\left(\frac{d\sigma}{do} \right)_{\text{el}} = \left(\frac{d\sigma}{do} \right)_{\text{Ruth}} |F(\mathbf{q})|^2. \quad (3.24)$$

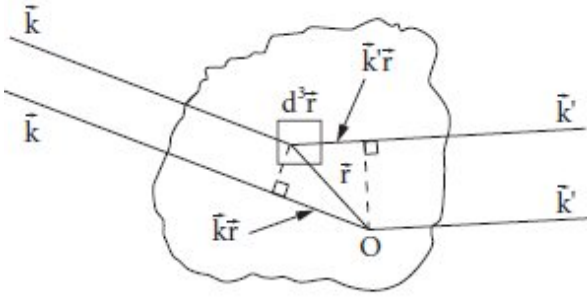


Рис. 3.2. Формфактор и интерференция волн рассеянных и разных элементов объёма.

Классическое сечение Резерфорда для частицы с энергией $\varepsilon = p^2/2m$ рассеянной на точечном заряде Ze (см. т.1, (1.129)),

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Ruth}} = \left(\frac{2mZe_0e}{\hbar^2 q^2}\right)^2 = \left(\frac{mZe_0e}{2\hbar^2 k^2 \sin^2(\theta/2)}\right)^2 = \left(\frac{Ze_0e}{4\varepsilon}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (3.25)$$

модифицировано статическим зарядовым формфактором

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{Ze} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{Ze} \int d^3r e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})} \langle \rho^{\text{ch}}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (3.26)$$

который есть нормированный фурье образ статической плотности заряда.

3.3 Статический формфактор

Смысл статического формфактора становится ясным из рисунка 3.2.

Рассмотрим интерференцию волн рассеянных элементом объёма в центре системы (опорная волна) и произвольным элементом объёма d^3r в точке \mathbf{r} . Как видно из рис. 3.2, эти волны идут под определённым углом к детектору с разностью фаз $(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = (\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$. Формфактор $F(\mathbf{q})$ есть суперпозиция всех волн, рассеянных различными элементами объёма на данный угол, корректно учитывающая их относительные фазы. При этом нужно помнить, что в рассматриваемом приближении подразумевается, что только однократное рассеяние имеет заметную вероятность.

Формфактор (3.26) удобно нормирован так, что

$$F(0) = 1. \quad (3.27)$$

для точечной мишени,

$$\langle \rho^{\text{ch}}(\mathbf{r}) \rangle = Ze\delta(\mathbf{r}), \quad (3.28)$$

формфактор $F(\mathbf{q}) \equiv 1$ и сечение (3.24) возвращается к формуле Резерфорда. В этом пределе вся система зарядов действует как единое целое. В реальной ситуации распределение зарядов в конечном объёме с неизбежностью порождает интерференцию, $|F(\mathbf{q})| < 1$, и упругое сечение уменьшается по сравнению с резерфордовским.

Если сделать обратное фурье-преобразование формфактора извлечённого из экспериментального сечения, то можно получить информацию о распределении плотности заряда внутри мишени. Для этой цели важно измерять сечение до максимально возможных передач импульса. На практике это трудно выполнимо, поскольку абсолютная величина сечения (3.24) определяется сечением Резерфорда, которое очень быстро падает с ростом q . Тем не менее, такие эксперименты были проведены с электронами рассеивавшимися на атомных и ядерных мишенях.

Предел $q \rightarrow 0$, когда справедливо уравнение (3.27) отвечает малым углам рассеяния θ . В терминах классической механики такое слабое рассеяние имеет место при больших *прицельных параметрах*, когда налетающая частица не проникает внутрь мишени и видит только полный заряд Ze . В этом случае справедлива формула Резерфорда. Малая передача импульса означает, что

$$qR \ll 1, \quad (3.29)$$

где R - характерный размер системы. В этом случае, разности фаз между волнами взаимодействующими с разными частями системы пренебрежимо малы; налетающая частица неспособна разрешить пространственную структуру мишени. Неравенство (3.29) всегда справедливо в пределе низких энергий, когда длина волны падающей частицы велика по сравнению с размером системы, $kR \ll 1$. Однако, даже при высоких энергиях, когда $kR \geq 1$, имеется область очень малых углов рассеяния (или далеко лежащих "траекторий") $\theta \leq 1/kR$, когда условие (3.29) всё ещё выполняется.

Следующие члены разложения формфактора по степеням q дают уже больше информации о распределении заряда. В случае сферически симметричного распределения заряда, $\langle \rho^{\text{ch}}(\mathbf{r}) \rangle = \rho^{\text{ch}}(r)$, интегрирование по углам

даёт ($(\eta = \cos \theta)$)

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{Ze} \int r^2 dr 2\pi \int_{-1}^1 d\eta e^{iqr\eta} = \frac{4\pi}{Ze} \int dr r^2 \rho^{\text{ch}}(r) \frac{\sin(qr)}{qr}. \quad (3.30)$$

В этом случае формфактор зависит только от модуля q и первый член разложения по степеням $qR < 1$ даёт

$$F(q) \approx \frac{4\pi}{Ze} \int dr r^2 \rho^{\text{ch}}(r) \left(1 - \frac{1}{6} q^2 r^2\right) = 1 - \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle, \quad (3.31)$$

где мы определили среднеквадратичный радиус ,

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{Ze} \int d^3r \rho^{\text{ch}}(r) r^2. \quad (3.32)$$

Эта величина может быть экспериментально определена по наклону формфактора, как функции q^2 в пределе (3.29).

Противоположный к (3.29) предел,

$$qR \gg 1, \quad (3.33)$$

достигается только при *высоких энергиях* или *малых длинах волн*, $kR \gg 1$, и не при слишком малых углах рассеяния. В этом случае экспонента $e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}$ быстро осциллирует на размере системы и для любого гладкого распределения зарядов вклады от разных областей сильно сокращаются, так что формфактор $F(\mathbf{q}) \rightarrow 0$. При больших q только мельчайшие структуры с размером меньше длины волны $1/q$ дают конструктивную интерференцию в формфактор. Но, для гладкого распределения заряда только пренебрежимо малая доля заряда находится в таком малом элементе объёма, что влечёт $F(\mathbf{q}) \rightarrow 0$ вместе с сечением. Если распределение заряда концентрируется в малых областях, например, сингулярности типа внутренних точечных зарядов, то формфактор будет выявлять их при передачах импульса сравнимых с обратным размером этих составляющих. Мы видели, что для идеализированного точечного заряда формфактор $F(q) = 1$ для всех q . Приведённые аргументы существенно повторяют объяснение соотношения неопределённости в приложении к разрешающей способности микроскопа. Для того, чтобы хорошо различать детали размера $\sim a$, необходим микроскоп с длиной волны света $\leq a$. Исторически, именно рассеяние электронов на нуклонах при больших передачах импульса (уже в релятивистской области) выявило существование точечных составляющих - партон (предположительно кварков и глюонов) внутри нуклонов [8].

Если распределение заряда не имеет сферической симметрии, фурье-компоненты $\rho_{\mathbf{q}}$, а вместе с ними и формфактор $F(\mathbf{q})$, зависят от направления передаваемого импульса \mathbf{q} . В этом случае удобно использовать разложение плоской волны по сферическим функциям (см. т.2, уравнение 6.31) и представить фурье-компоненты как

$$\rho_{\mathbf{q}} = \int d^3r e^{-i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})} \rho(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{LM} (-i)^L Y_{LM}^*(\mathbf{n}_{\mathbf{q}}) \rho_{LM}(q), \quad (3.34)$$

где *мультипольные компоненты* плотности равны ($(\mathbf{n} = \mathbf{r}/r)$)

$$\rho_{LM}(q) = \int d^3r j_L(qr) Y_{LM}(\mathbf{n}) \rho(\mathbf{r}). \quad (3.35)$$

В длинноволновом пределе, $qR \ll 1$, сферические функции Бесселя могут быть разложены в ряд (см. т.2, уравнение 2.91),

$$(\rho_{LM})_{qR \ll 1} = \frac{q^L}{(2L+1)!!} \int d^3r r^L Y_{LM}(\mathbf{n}) \rho(\mathbf{r}), \quad (3.36)$$

Этот интеграл есть не что иное, как мультипольный момент системы (см. т. 1, уравнение 21.61),

$$(\rho_{LM})_{qR \ll 1} = \frac{q^L}{(2L+1)!!} \mathcal{M}_{LM}, \quad (3.37)$$

Таким образом, угловая зависимость формфакторов позволяет получить ценную информацию о высших мультипольных моментах системы; их вклад в сечение возрастает с увеличением передаваемого импульса q . Это справедливо как для операторов плотности и мультипольных моментов, так и для их средних значений. Мы также не уточняли, что речь идёт именно о плотности заряда, так как подобным же образом можно определить плотности, формфакторы и мультипольные моменты для любой аддитивной величины. Заметим, однако, что ненулевое среднее значение мультипольных моментов ранга L может существовать только если полный момент системы удовлетворяет условию треугольника $L \leq 2J$ (см. Т.2, уравнение 7.41).

3.4 Экранировка

Предыдущие результаты не могут быть непосредственно использованы для рассеяния на нейтральной системе, $Z = 0$. В этом случае кулоновское поле исчезает на больших расстояниях. Но, если положительные и

отрицательные компоненты зарядового распределения имеют различную пространственную структуру, то электрическое поле существует в окрестности системы (см. т. 2, задача 3.6), и вызывает рассеяние заряженных частиц.

Рассмотрим рассеяние заряженной частицы на *нейтральном* атоме, который содержит ядро с зарядом Ze и Z атомных электронов. Плотность заряда,

$$\rho^{\text{ch}}(\mathbf{r}) = \rho_{\text{nucl}}(\mathbf{r}) + \rho_e(\mathbf{r}), \quad (3.38)$$

равна нулю на достаточно больших расстояниях ($r \gg R_{\text{at}}$). При нерелятивистских энергиях электрона (мы ограничимся только этим случаем) длина волны электрона всегда много больше размеров ядра, $qR_{\text{nucl}} \ll 1$. Поэтому, ядро может рассматриваться как точечный заряд, $F_{\text{nucl}}(\mathbf{q}) = 1$. Полный атомный зарядовый формфактор в этом приближении равен

$$F_{\text{at}}(\mathbf{q}) = 1 - F_e(\mathbf{q}). \quad (3.39)$$

Сечение рассеяния электрона атомом приобретает вид

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{el}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Ruth}} |1 - F_e(\mathbf{q})|^2. \quad (3.40)$$

Электронный формфактор $F_e(\mathbf{q})$ стремится к нулю при $qR_{\text{at}} \gg 1$. Это отвечает близким траекториям и большим (в атомном масштабе) передачам импульса. Тогда, падающая частица может находиться в области атома ближе к ядру, чем нижайшая электронная орбита, и законы электростатики говорят нам, что электрическое поле создаётся в этой области почти полностью ядром. Уравнение (3.40) показывает, что в этом случае мы имеем резерфордское рассеяние на ядре. В противоположном пределе, при малых передачах импульса, $qR_{\text{at}} \ll 1$, электронный формфактор $F_e(\mathbf{q}) \rightarrow 1$, и упругое рассеяние исчезает. Здесь мы имеем большие прицельные параметры и далёкие траектории, где поле ядра полностью *экранируется* электронами. Таким образом, экранировка электронами работает при

$$qR_{\text{at}} = kR_{\text{at}} \sin \frac{\theta}{2} \leq 1. \quad (3.41)$$

Следует однако помнить, что наш подход основан на теории возмущений и относится к однократному рассеянию. Это может быть справедливо только для быстрых (хотя всё ещё нерелятивистских) электронов со скоростью $v = \hbar k/m$ больше, чем скорости атомных электронов $v_{\text{at}} \sim p_{\text{at}}/m \sim \hbar/mR_{\text{at}}$,

то есть при $kR_{\text{at}} > 1$. Поэтому область (3.41), где существенна экранировка относится к малым углам, $\theta \leq 1/(kR_{\text{at}})$. В результате, рассеяние на малые углы имеет конечное сечение, в то время как чисто резерфордовское сечение расходится $\propto 1/\theta^4$.

Задача 3.1

Вычислить формфактор для основного состояния атома водорода

1. для точечного протона,
2. для протона конечного размера считая, что заряд протона равномерно распределён в сферическом объёме радиуса $R_p = 0.8 \text{ fm}$.

Решение

Вклад электрона в атомный формфактор равен

$$F_e(\mathbf{q}) = -\frac{e}{\pi a^3} \int d^3r e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})-2r/a} = -\frac{e}{[1 + (qa/2)^2]^2}. \quad (3.42)$$

Здесь формфактор нормирован на $F_e(0) = -e$, полный заряд электронного облака. Когда длина волны падающей частицы становится много меньше размера атома, $qa \gg 1$, формфактор стремится к нулю $\sim (qa)^{-4}$, что свидетельствует об отсутствии всяких сингулярностей или скопления заряда на малых масштабах: нет более мелких структур.

1. В противоположность этому точечный протон имеет заряд сконцентрированный в исчезающе малом объёме, так что его формфактор вообще не зависит от q ,

$$\rho_p(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r}) \quad \rightsquigarrow \quad F_p(\mathbf{r}) = e. \quad (3.43)$$

В этом приближении длина волны падающей частицы, $\sim 1/q$, всегда больше, чем размер протона, поэтому протон выглядит как точка. Полный атомный формфактор равен

$$F_H(q) = e \left\{ 1 - \frac{1}{[1 + (qa/2)^2]^2} \right\}. \quad (3.44)$$

При длинах волн больших, чем боровский радиус электронное облако экранирует протон, атом выглядит как нейтральный объект и формфактор зануляется. По мере уменьшения длины волны, формфактор растёт как $\sim e(qa/2)^2$. А когда $qa \gg 1$, электронный вклад исчезает и виден только заряд точечного протона (на очень малых расстояниях находится пренебрежимо малая часть электронного заряда).

2. Для протона, рассматриваемого как малая сфера радиуса R_p , зарядовый формфактор, вместо (3.43), равен

$$F_p(q) = \frac{e}{(4\pi/3)R_p^3} \int_{r \leq R_p} d^3r e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})} = \frac{3e}{x^3} (\sin x - x \cos x), \quad x = qR_p. \quad (3.45)$$

Параметр x даёт сравнение длины волны $\sim 1/q$ с размером протона R_p . Для больших длин волн, $x \ll 1$, мы возвращаемся к пределу точечного заряда (3.43) так как $\sin x \approx x - x^3/6$ и $\cos x \sim 1 - x^2/2$. Для малых длин волн, $x \gg 1$, формфактор (3.45) осциллируя стремится к нулю как $\cos x/x^{-2}$ (опять, нет более мелких структур внутри протона в этом приближении). Передаваемый импульс для эксперимента предназначенного увидеть размер протона должен соответствовать длине волны порядка этого размера, $x \geq 1$, то есть как минимум

$$q \sim \frac{1}{R_p}, \quad \hbar q \sim \frac{\hbar}{R_p} = 250 \text{ MeV}/c. \quad (3.46)$$

3.5 Возбуждение и ионизация атомов

При *неупругом* рассеянии быстрых частиц на атоме, когда атом возбуждается, $i \rightarrow f$, сечение даётся уравнением (3.22), где фигурирует неупругий формфактор

$$F_{fi}(\mathbf{q}) = \frac{1}{Ze} \langle f | \rho_{\mathbf{q}}^{(\text{nucl})} - \rho_{\mathbf{q}}^{(e)} | i \rangle. \quad (3.47)$$

Для нерелятивистской налетающей частицы ядро может рассматриваться как точечное, $\rho_{\mathbf{q}}^{(\text{nucl})} = Ze$, и эта константа не может вызывать никаких атомных переходов. Ясно, что оператор $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(\text{nucl})}$ действует только на внутренние переменные ядра и может вызывать возбуждение ядерных внутренних степеней свободы. Но нерелятивистская частица не имеет для этого достаточной энергии и единственная возможность для неё - возбуждение атомных электронных оболочек. В этом случае неупругое сечение даётся

$$\frac{d\sigma_{fi}}{do} = \left(\frac{2me_0e}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \frac{p'}{p} \left| \left\langle f \left| \sum_{a=1}^Z e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)} \right| i \right\rangle \right|^2. \quad (3.48)$$

Оператор

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{a=1}^Z e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)} \quad (3.49)$$

есть фурье-компонента полной электронной плотности [заряд $e_a \equiv e$ убран из плотности заряда (3.48)]. Эта величина есть *одночастичный оператор* в том смысле, что он состоит из Z членов, каждый из которых действует на переменные одного электрона и может изменить только ту часть волновой функции, которая зависит от этих переменных. Состояние $|f\rangle$ поэтому имеет, в каждой из своих компонент, один электрон перемещённый на другую орбиту и дырку в прежде занятом состоянии. Это состояние мы называем *одночастичным* возбуждением или возбуждением типа *частица - дырка*. Комбинации одночастичных переходов могут быть когерентными (синхронное движение частиц и дырок) и соответствовать *коллективным* возбуждениям (см. Т. 1, раздел 10.8).

Передаваемый импульс для неупругого рассеяния записывается, в отличие от (3.23), как

$$q^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta. \quad (3.50)$$

Минимальный переданный импульс при данной энергии возбуждения достигается при рассеянии вперёд,

$$q_{\min} \approx k - k' = \frac{\Delta p}{\hbar} \sim \frac{\Delta \varepsilon}{\hbar v} = \frac{E_f - E_i}{\hbar v}. \quad (3.51)$$

Его величина удовлетворяет условию $q_{\min} R_{\text{at}} \ll 1$. Действительно, простые оценки из соотношения неопределённостей и справедливости теории возмущений показывают, что

$$q_{\min} \sim \frac{mv_{\text{at}}^2}{\hbar v} \sim \frac{v_{\text{at}}}{v} \frac{p_{\text{at}}}{\hbar} \sim \frac{v_{\text{at}}}{v} \frac{1}{R_{\text{at}}} \ll \frac{1}{R_{\text{at}}}. \quad (3.52)$$

С другой стороны, для быстрых частиц,

$$q_{\max} = k + k' \approx 2k > \frac{1}{R_{\text{at}}}. \quad (3.53)$$

Это значит, что параметр qR_{at} меняется в широких пределах.

При малых qR_{at} можно разложить экспоненту (3.48),

$$\frac{d\sigma_{fi}}{do} = \left(\frac{2me_0e}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \frac{p'}{p} \left| \left(\mathbf{q} \cdot \sum_a \mathbf{r}_a \right)_{fi} \right|^2. \quad (3.54)$$

Вводя оператор дипольного момента (см. Т. 1, уравнение 21.63) мы получаем

$$\frac{d\sigma_{fi}}{do} = \left(\frac{2me_0}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \frac{p'}{p} |\mathbf{q} \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (3.55)$$

то есть, *дипольные переходы* являются наиболее вероятными. Ниже мы увидим, что дипольные переходы являются также и наиболее интенсивными в оптическом диапазоне излучения и поглощения атомов. При больших q роль высших мультипольных переходов возрастает.

По мере увеличения qR_{at} , когда он становится больше единицы, экспонента в матричном элементе начинает быстро осциллировать в области интегрирования. Сечение может иметь заметную величину только если волновая функция конечного состояния одного из электронов сокращает эту экспоненту. Это возможно, если один из электронов описывается плоской волной с импульсом близким к $-\mathbf{q}$. В этом случае импульс приближённо сохраняется так, что налетающая частица передаёт почти весь импульс $-\mathbf{q}$ электрону, который переходит в непрерывный спектр и атом *ионизируется*. Этот случай напоминает классическое столкновение частицы массы m_0 со свободным электроном; импульс отдачи ядра здесь мал. Максимальные передаваемые импульсы при таком столкновении равны

$$\hbar q_{\text{max}} = 2mv = \frac{2m_0m_e}{m_0 + m_e} v = \begin{cases} 2m_e v, & m_0 \gg m_e, \\ m_e v, & m_0 = m_e. \end{cases} \quad (3.56)$$

3.6 Потери энергии

Быстрая заряженная частица теряет в веществе свою энергию путём возбуждения и ионизации атомов. Пусть вещество содержит n атомов в единице объёма. На длине dx падающая частица будет в среднем иметь число столкновений, сопровождаемых переходами $i \rightarrow f$, равное $n\sigma_{fi}dx$, где σ_{fi} есть проинтегрированное по углам сечение для данного перехода. В каждом акте такого столкновения частица передаёт атому энергию $\varepsilon - \varepsilon' = E_f - E_i$. Полная потеря энергии на единицу длины даётся суммой всех возможных переходов $i \rightarrow f$,

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = -n \sum_f \sigma_{fi} (E_f - E_i). \quad (3.57)$$

В случае дифференциального сечения (3.48), вычисленного по теории возмущений, для потерь энергии получаем

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = -n \sum_f (E_f - E_i) \int d\Omega \left(\frac{2me_0e}{\hbar^2 q^2} \right)^2 \frac{k'}{k} |(\rho_{\mathbf{q}})_{fi}|^2, \quad (3.58)$$

где как и ранее,

$$(\rho_{\mathbf{q}})_{fi} = \left\langle f \left| \sum_a e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)} \right| i \right\rangle. \quad (3.59)$$

Для анализа этого выражения удобно перейти от интегрирования по углу рассеяния θ к интегрированию по передаваемому импульсу q . Из (3.50) мы находим

$$q dq = k k' \sin \theta d\theta, \quad \frac{k'}{k} d\theta \rightarrow 2\pi \frac{k'}{k} \sin \theta d\theta = \frac{2\pi q}{k^2} dq. \quad (3.60)$$

С этой заменой переменных и используя $v = \hbar k/m$, мы получаем из (3.58)

$$-\frac{d\varepsilon}{dx} = 2\pi n \left(\frac{2e_0 e}{\hbar v} \right)^2 \sum_f (E_f - E_i) \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} |(\rho_{\mathbf{q}})_{fi}|^2. \quad (3.61)$$

Вычисление суммы по конечным состояниям в (3.61) является сложной задачей, так как в согласии с законами сохранения, пределы интегрирования q_{\min} и q_{\max} различны для разных конечных состояний.

Хорошую оценку суммы можно получить, если заменить точные пределы интегрирования их некоторыми средними значениями \bar{q}_{\min} и \bar{q}_{\max} . В этом случае мы можем поменять порядок суммирования по конечным состояниям и интегрирования,

$$-\frac{d\varepsilon}{dx} \approx 2\pi n \left(\frac{2e_0 e}{\hbar v} \right)^2 \int_{\bar{q}_{\min}}^{\bar{q}_{\max}} \frac{dq}{q^3} \sum_f (E_f - E_i) |(\rho_{\mathbf{q}})_{fi}|^2. \quad (3.62)$$

Сумма в (3.62) вычисляется точно с помощью *правила сумм* Т. 1, уравнение (7.146), что даёт

$$\sum_f (E_f - E_i) |(\rho_{\mathbf{q}})_{fi}|^2 = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} Z, \quad (3.63)$$

где Z - число электронов в атоме (атомный номер элемента). Теперь можно провести интегрирование в (3.62) и получить

$$-\frac{d\varepsilon}{dx} \approx 4\pi n Z \frac{e_0^2 e^2}{m_e v^2} \ln \frac{\bar{q}_{\max}}{\bar{q}_{\min}}. \quad (3.64)$$

Результат (3.64) оправдывает приближение, сделанное в (3.62). Зависимость от пределов интегрирования достаточно слабая (логарифмическая).

Более того, этот результат не содержит постоянной Планка и поэтому является существенно классическим; как таковой, он может быть получен в классической электродинамике [9]. Тем не менее, квантовые аргументы существенны при выборе пределов \bar{q} .

Согласно оценкам (3.53) и (3.56), для заметных переходов $\hbar\bar{q}_{\max} \sim m_e v$. Максимальный передаваемый импульс отвечает минимальному прицельному параметру $b_{\min} \sim (\bar{q}_{\max})^{-1} \sim \hbar/(m_e v)$ порядка длины волны электрона в системе связанной с налетающей частицей. Классический результат (3.64) справедлив только для таких столкновений. Что касается нижнего предела передаваемого импульса, то, как видно из (3.51), $\hbar\bar{q}_{\min} \sim \bar{E}/v$, где \bar{E} - некоторая средняя энергия порядка энергии связи электронов в атоме. Эта оценка минимального передаваемого импульса отвечает максимальному прицельному параметру $b_{\max} \sim (\bar{q}_{\min})^{-1} \sim (\bar{\omega}/v)^{-1}$, где $\bar{\omega}$ - характерная атомная частота. При больших прицельных параметрах, $b > v/\bar{\omega}$, мы приходим к столкновениям с эффективным временем взаимодействия $\tau \sim b/v$ большим по сравнению с атомными периодами $1/\bar{\omega}$. В этом случае, налетающая частица действует на систему адиабатически, см. раздел 1.4, и вероятность возбуждения становится малой.

На основании этих соображений мы приходим к формуле Бете,

$$-\frac{d\varepsilon}{dx} \approx 4\pi n Z \frac{e_0^2 e^2}{m_e v^2} \ln \frac{m_e v^2}{\bar{E}}. \quad (3.65)$$

Как видно из этой формулы, потери энергии зависят только от скорости частицы и не зависят от её массы. Масса будет определять только средний угол многократного рассеяния заряженной частицы в веществе. Этот угол возрастает с уменьшением массы частицы.

В практических применениях необходимо будет учитывать релятивистские эффекты, поляризацию среды налетающей частицей и (для электронов) обменные эффекты с электронами в среде (обмен для тождественных частиц будет обсуждаться позднее). Кроме того, роль других механизмов потери энергии, таких как тормозное излучение в поле ядра, возрастает с энергией падающей частицы. Методы квантовой электродинамики дают оценку [10] для отношения ионизационных потерь (обсуждаемых выше) и потерь на тормозное излучение,

$$\frac{(d\varepsilon/dx)_{\text{rad}}}{(d\varepsilon/dx)_{\text{ion}}} \approx \frac{Z\varepsilon(\text{MeV})}{600}. \quad (3.66)$$

В дополнение к этому, для частиц с энергией несколько десятков МэВ, процессы возбуждения и развала ядер вещества также становятся заметными.

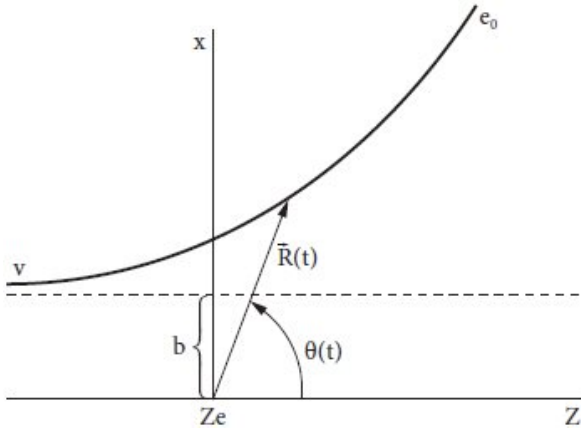


Рис. 3.3. Кинематика экспериментов по кулоновскому возбуждению.

3.7 Кулоновское возбуждение

Подобный подход по теории возмущений работает в задаче о движении быстрой заряженной частицы по заданной квазиклассической траектории $\mathbf{R}(t)$ в кулоновском поле мишени, рис. 3.3. Это типичная ситуация в ядерных экспериментах, где мы интересуемся слабыми возбуждениями, а траектория отбирается прицельными параметрами таким образом, чтобы ядро налетающей частицы и ядро мишени не перекрывались и эффекты сильного, но короткодействующего взаимодействия были бы практически исключены. Такие эксперименты, в частности, дают возможность обнаружения низко-лежащих возбуждённых состояний коротко-живущих ядер используя их, как падающие частицы в последующих столкновениях (*обратная кинематика*).

В системе координат мишени налетающая частица (с зарядом e_0) окружена кулоновским полем действующим на Z составляющих в мишени с координатами \mathbf{r}_a , (с зарядами e_a),

$$\hat{H}' = e_0 \sum_{a=1}^Z \frac{e_a}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}(t)|}. \quad (3.67)$$

Предполагая, что траектория $\mathbf{R}(t)$ лежит вне мишени, мы используем разложение (см. Т.1 уравнение 21.57) по полиномам Лежандра,

$$\hat{H}' = e_0 \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_a \frac{e_a r_a^{\ell}}{R^{\ell+1}(t)} P_{\ell}(\cos \theta_a(t)), \quad (3.68)$$

где $\theta_a(t)$ - зависящий от времени угол между \mathbf{r}_a и $\mathbf{R}(t)$. Первый порядок теории возмущений, зависящих от времени, (см. уравнение 1.12) даёт для амплитуды перехода $i \rightarrow f$,

$$a_f = -\frac{ie_0}{\hbar} \sum_{\ell} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{fi}t}}{R^{\ell+1}(t)} \left\langle f \left| \sum_a e_a r_a^{\ell} P_{\ell}(\cos \theta_a(t)) \right| i \right\rangle. \quad (3.69)$$

Если траектория $R(t)$ достаточно далека от мишени, мультипольное разложение (3.69) быстро сходится и мы можем ограничиться нижними мультипольностями l . *Монопольный* член, $\ell = 0$, не даёт вклада в неупругое рассеяние в силу ортогональности состояний $|i\rangle$ и $|f\rangle$. В атомной физике главный член соответствует *дипольным* переходам, $\ell = 1$. В ядерной физике сильнейшие низколежащие переходы имеют в большинстве случаев *квадрупольный* характер, $\ell = 2$.

Рассмотрим дипольный случай более детально,

$$a_f = -\frac{ie_0}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega_{fi}t}}{R^2(t)} \left\langle f \left| \sum_a e_a \left(\mathbf{r}_a \cdot \frac{\mathbf{R}(t)}{R(t)} \right) \right| i \right\rangle. \quad (3.70)$$

Если координатные оси направлены как на рис.3.3, оператор в (3.70) может быть записан, как

$$\left(\mathbf{r}_a \cdot \frac{\mathbf{R}(t)}{R(t)} \right) = x_a \sin \theta(t) + z_a \cos \theta(t), \quad (3.71)$$

где все углы θ_a для далёких траекторий приближённо совпадают с $\theta(t)$. Если мишень в начальном состоянии имеет сферически симметричное распределение заряда, то орбитальный момент налетающей частицы сохраняется вдоль траектории,

$$L = mbv = mR^2\dot{\theta} \quad \rightsquigarrow \quad \frac{dt}{R^2} = \frac{d\theta}{bv}, \quad (3.72)$$

b - прицельный параметр, рис. 3.3. Вводя оператор дипольного момента и переходя от времени вдоль траектории к углу $\theta(t)$ мы приходим к амплитуде

$$a_f(b) = -\frac{ie_0}{\hbar bv} \int_{-\pi}^{\theta(b)} d\theta e^{i\omega_{fi}t(\theta)} [(d_x)_{fi} \sin \theta + (d_z)_{fi} \cos \theta], \quad (3.73)$$

где $\theta(b)$ - классический угол рассеяния при $t \rightarrow \infty$ для траектории падающей частицы вдоль оси z и характеризуемой прицельным параметром b .

Часть траектории, отвечающая наименьшему расстоянию, $R \sim b$, даёт основной вклад в вероятность возбуждения. Если положить $t = 0$ в момент наибольшего сближения, то $R(t) \approx \sqrt{b^2 + v^2 t^2}$ для далёких траекторий с малым углом рассеяния. Поэтому, эффективное время взаимодействия будет порядка $\tau = b/v$. Если это время слишком велико, $\tau \gg \omega_{fi}^{-1}$, то возмущение меняется слишком медленно и мы приходим к адиабатическому режиму с малой вероятностью возбуждения. Для $\tau < \omega_{fi}^{-1}$ мы можем пренебречь экспонентой в подинтегральном выражении в (3.73) и в результате интегрирования получаем

$$a_f(b) = -\frac{ie_0}{\hbar bv} \left(-(d_x)_{fi} [1 + \cos \theta(b)] + (d_z)_{fi} \sin \theta(b) \right). \quad (3.74)$$

Поскольку угол рассеяния $\theta(b)$ предполагается малым, то главный вклад в (3.74) идёт от компоненты дипольного момента перпендикулярной по отношению к направлению падающего пучка,

$$a_f(b) \approx \frac{2ie_0}{\hbar bv} (d_x)_{fi}. \quad (3.75)$$

Задача 3.2

Используя дипольное правило сумм (см. Т.1, уравнение 7.138) показать, что (3.75) даёт тот же результат (3.65) для потерь энергии.

Решение Средние потери энергии в столкновении с прицельным параметром b даются в приближении (3.75) выражением

$$-\left(\frac{d\varepsilon}{dx}\right)_b = n \sum_f |a_f(b)|^2 (E_f - E_i) = \frac{4e_0^2 n}{\hbar^2 v^2 b^2} \sum_f |(d_z)_{fi}|^2 (E_f - E_i). \quad (3.76)$$

Дипольное правило сумм даёт

$$-\left(\frac{d\varepsilon}{dx}\right)_b = \frac{2Ze_0^2 e^2 n}{mv^2} \frac{1}{b^2}, \quad (3.77)$$

где m - масса составляющих мишени. Наконец, интегрирование по прицельным параметрам,

$$-\frac{d\varepsilon}{dx} = \int 2\pi b db \left(\frac{d\varepsilon}{dx}\right)_b, \quad (3.78)$$

воспроизводит результат (3.65), если в качестве пределов интегрирования выбрать значения, обсуждавшиеся выше.

В квантовой теории все физические сущности имеют свойства как полей, так и частиц и поэтому квантовая теория, несмотря на свою сложность, демонстрирует глубокую гармонию природы.

С.Н. Гупта, *Квантовая
электродинамика*

Глава 4

Фотоны

4.1 Введение: классическое и квантовое поле

В нашем обсуждении когерентных состояний (см. Т. 1, раздел 12.6) мы касались вопроса о связи между классическим и квантовым описанием фазы и интенсивности (измеряемой числом квантов) волны в одномодовой системе. Классический предел получается когда много-квантовая функция, такая как, например, когерентное состояние, имеет определённую фазу и малые относительные флуктуации числа квантов, $\Delta N/N \ll 1$. Это выполняется в пределе $N \gg 1$, когда интенсивность настолько велика, что дискретность числа квантов становится физически несущественной. Противоположный предел малых N требует полного квантового описания. Нам нужно развить описание электромагнитного поля, а в общем случае, любого волнового поля в квантовом пределе.

В наших предыдущих подходах предполагалось, что движение частиц происходит в заданных *внешних* полях потенциальной или магнитной природы, стационарных или зависящих от времени. Такое описание определённо имеет ограниченную область применимости. В приближении фиксированного поля пренебрегается обратным влиянием частиц на поле. Квантовые системы излучают и поглощают фотоны и поэтому меняют внешнее поле. Этим можно пренебречь только для классических интенсивных полей. В противоположном случае, квантовая природа поля и его взаимодействие с веществом становятся решающими. В общем случае, поле само должно рассматриваться как специфическая квантовая система взаимодействующая с другими квантовыми системами (твёрдыми телами, молекулами, атомами, ядрами, частицами). Новое свойство поля, по сравнению с нашим предыдущим опытом, заключается в том, что поле имеет *бесконечное* число степеней свободы - его "координатами" являются амплитуды поля в каждой точке пространства.

Поле (например, электрическое поле $\vec{\mathcal{E}}$) может иметь классический смысл только после усреднения по некоторому пространственному объёму ΔV и промежутку времени Δt . Такое усреднение связано с неопределённостью в энергии $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$. В классическом случае эта неопределённость должна быть меньше, чем полная энергия поля в этом объёме, $E \sim \mathcal{E}^2 \Delta V \gg \hbar/\Delta t$. Если нас интересует компонента поля с частотой ω или периодом $T \sim 1/\omega$, то интервал усреднения должен быть много меньше, чем T , иначе поле усреднится до нуля. Это значит, что $\Delta t \ll 1/\omega$, и поэтому $\hbar/\Delta t \gg \hbar\omega$. Отсюда следует, что средняя энергия классического поля должна удовлетворять условию $E \gg \hbar\omega$, и среднее число квантов в классическом пределе велико $N \sim E/\hbar\omega \gg 1$. Это условие необходимо для того, чтобы можно было игнорировать влияние процессов излучения и поглощения на поле ($\Delta N \ll N$).

Квантование классического поля, как и любой переход к более общей теории, требует некоторых постулатов. Мы рассмотрим эту процедуру в упрощённом виде для электромагнитного поля; полную теорию можно найти в книгах по квантовой электродинамике [10]. Мы рассмотрим только поля излучения в пустом пространстве и покажем как можно перейти от непрерывно меняющихся волновых полей $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{B}}$ к *фотонам* (напомнить Т.1, глава 1), число которых, их энергия и импульс могут меняться дискретно в процессах излучения и поглощения квантов веществом.

4.2 Гамильтоново описание поля излучения

Наша стратегия будет заключаться в следующем. Энергию классического электромагнитного поля мы представим как сумму энергий набора (бесконечно большого) гармонических осцилляторов с различными волновыми векторами, поляризациями и частотами. Затем мы постулируем, что эти осцилляторы должны быть проквантованы стандартным образом.

Поле излучения распространяющееся в свободном пространстве может описываться в различных калибровках. Пользуясь этой свободой мы всегда можем работать только с векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, полагая что скалярный потенциал отсутствует, $\varphi = 0$ (радиационная калибровка). Дополнительно, в свободном пространстве $\text{div } \vec{\mathcal{E}} = 0$, что будет выполняться, если

$$\text{div } \mathbf{A} = 0. \quad (4.1)$$

Эта радиационная калибровка очень удобна для наших целей. Чтобы избежать вопросов, связанных с поведением полей на бесконечности, мы

используем периодические граничные условия во вспомогательном объёме $V = L^3$; реальный резонатор может описываться подобным же образом. В этом случае все волновые вектора дискретны (см. Т. 1, раздел 3.8).

Мы начнём с пространственного фурье-разложения классического векторного потенциала. Векторный потенциал - действительная величина, а наши базисные функции - комплексные плоские волны. Из-за этого наше разложение должно состоять из двух комплексно сопряжённых слагаемых,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right). \quad (4.2)$$

Из-за условия калибровки (4.1), комплексные вектора $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t)$ должны быть ортогональны своим волновым векторам

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}) = 0. \quad (4.3)$$

Таким образом, при условии (4.1), поперечный характер поля излучения учитывается автоматически с самого начала.

Временная зависимость амплитуд $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t)$ определяется динамикой классических полей. В пространстве свободном от зарядов и токов векторный потенциал подчиняется *волновому уравнению*

$$\square \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \equiv \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (4.4)$$

Поскольку различные компоненты разложения (4.2) линейно независимы, то каждая из них должна удовлетворять волновому уравнению. Это даёт

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) = \mathbf{b}_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_k t}, \quad \omega_k = ck. \quad (4.5)$$

Здесь мы полагаем $\omega_k > 0$, а решения с $\omega_k < 0$ содержатся во втором члене суммы (4.2); в обеих частях мы суммируем по всем квантованным векторам \mathbf{k} .

Векторный потенциал определяет электрическое и магнитное поля,

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{i}{c} \sum_{\mathbf{k}} \omega_k \left(\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right), \quad (4.6)$$

$$\vec{\mathcal{B}} = \text{curl } \mathbf{A} = i \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \times \left(\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right). \quad (4.7)$$

С этими выражениями мы можем сосчитать энергию поля излучения,

$$E = E_{\text{el}} + E_{\text{magn}} = \int_V d^3r \frac{\vec{\mathcal{E}}^2 + \vec{\mathcal{B}}^2}{8\pi}. \quad (4.8)$$

Энергия свободного поля должна сохраняться. Однако, прямая подстановка разложений (4.6) и (4.7) в (4.8) даёт, на первый взгляд, зависящие от времени члены. Проследим теперь, как неправильные члены сокращаются.

Первое, интеграл по объёму от произведения двух экспонент, которые входят в выражение для квадрата поля, даёт символ Кронекера,

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{k} \pm \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} = V \delta_{\mathbf{k}', \mp \mathbf{k}}. \quad (4.9)$$

Коль скоро два вектора в каждом сомножителе имеют одну и ту же величину, $\mathbf{k}' = \pm \mathbf{k}$, то соответствующие частоты равны, $\omega_{k'} = \omega_k$. Электрическая часть энергии редуцируется к

$$E_{\text{el}} = \frac{V}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \left\{ \left((\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*) + (\text{с.с.}) \right) - \left((\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{-\mathbf{k}}) e^{-2i\omega_k t} + (\text{с.с.}) \right) \right\}. \quad (4.10)$$

Тем же путём мы для магнитной энергии получаем,

$$E_{\text{magn}} = \frac{V}{8\pi} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left([\mathbf{k} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}] \cdot [\mathbf{k} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*] + (\text{с.с.}) \right) + \left([\mathbf{k} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}] \cdot [\mathbf{k} \times \mathbf{b}_{-\mathbf{k}}] e^{-2i\omega_k t} + (\text{с.с.}) \right) \right\}. \quad (4.11)$$

В обоих выражениях (с.с.) означает комплексно сопряжённый член. Легко увидеть, что из-за поперечного характера поля (4.3), не зависящие от времени члены в электрическом и магнитном вкладах равны и складываются, в то время как зависящие от времени вклады сокращаются. Например, первый член в магнитной энергии содержит

$$\begin{aligned} [\mathbf{k} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}] \cdot [\mathbf{k} \times \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*] &= \varepsilon_{ijl} \varepsilon_{imn} k_j (b_{\mathbf{k}})_l k_m (b_{\mathbf{k}}^*)_n = (\delta_{jm} \delta_{ln} - \delta_{jn} \delta_{lm}) k_j (b_{\mathbf{k}})_l k_m (b_{\mathbf{k}}^*)_n \\ &= k^2 (\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*) - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*) = k^2 (\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Поэтому, члены не сохраняющие энергию исчезают и

$$E = \frac{V}{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \left((\mathbf{b}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^*) + (\text{с.с.}) \right). \quad (4.13)$$

До квантования величина $(\mathbf{b}_\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_\mathbf{k}^*)$ - действительна и можно просто удвоить этот член. Однако, впоследствии амплитуды $\mathbf{b}_\mathbf{k}$ станут *операторами*.

Поперечная плоская волна может иметь две *поляризации* в плоскости перпендикулярной \mathbf{k} . Их можно описать с помощью двух ортогональных, действительных единичных векторов, $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}$, $\lambda = 1, 2$, расположенных в этой плоскости

$$(\mathbf{e}_{1\mathbf{k}} \cdot \mathbf{e}_{2\mathbf{k}}) = (\mathbf{e}_{1\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k}) = (\mathbf{e}_{2\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k}) = 0. \quad (4.14)$$

Три единичных вектора $\mathbf{e}_{1\mathbf{k}}$, $\mathbf{e}_{2\mathbf{k}}$ и $\mathbf{e}_{0\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$, образуют правую декартову тройку и описывают две возможные *линейные поляризации* волны с данным \mathbf{k} . Другой удобный выбор базисных векторов - два комплексных вектора в этой плоскости,

$$\mathbf{e}_\mathbf{k}^\pm = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_{1\mathbf{k}} \pm i\mathbf{e}_{2\mathbf{k}}). \quad (4.15)$$

Скалярное произведение этих векторов должно быть определено с дополнительным комплексным сопряжением левого вектора,

$$(\mathbf{e}_\mathbf{k}^{\pm*} \cdot \mathbf{e}_\mathbf{k}^\pm) = 1, \quad (\mathbf{e}_\mathbf{k}^{\pm*} \cdot \mathbf{e}_\mathbf{k}^\mp) = 0. \quad (4.16)$$

Этот выбор, совпадающий с собственными векторами спина 1 для проекций ± 1 (см. т.1, уравнение 16.32), отвечает *циркулярной* (левой или правой) поляризации. В любом случае, поперечная амплитуда может быть представлена как суперпозиция двух независимых поляризаций,

$$\mathbf{b}_\mathbf{k} = \sum_{\lambda \neq 0} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} b_{\lambda\mathbf{k}}, \quad (4.17)$$

где векторы $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}$ и амплитуды $b_{\lambda\mathbf{k}}$ в общем случае комплексные. Теперь, каждая степень свободы поля в объёме V (*нормальная мода*) характеризуется волновым вектором и поляризацией и все моды дают независимые вклады в энергию,

$$E = \sum_{\mathbf{k}\lambda} E_{\lambda\mathbf{k}}, \quad E_{\lambda\mathbf{k}} = \frac{V k^2}{2\pi} b_{\lambda\mathbf{k}} b_{\lambda\mathbf{k}}^*. \quad (4.18)$$

Координаты и импульсы нормальных мод определяются как

$$Q_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (b_{\lambda\mathbf{k}} + b_{\lambda\mathbf{k}}^*), \quad P_{\lambda\mathbf{k}} = -i\omega_k \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}} (b_{\lambda\mathbf{k}} - b_{\lambda\mathbf{k}}^*). \quad (4.19)$$

Уравнение (4.5) показывает, что эти переменные удовлетворяют стандартным уравнениям движения для гармонических осцилляторов,

$$\dot{Q}_{\lambda\mathbf{k}} = P_{\lambda\mathbf{k}}, \quad \dot{P}_{\lambda\mathbf{k}} = \ddot{Q}_{\lambda\mathbf{k}} = -\omega_k^2 Q_{\lambda\mathbf{k}}. \quad (4.20)$$

Энергия поля (4.18) выраженная в терминах координат и сопряжённых им импульсов есть классическая *функция Гамильтона*,

$$H = \sum_{\lambda\mathbf{k}} H_{\lambda\mathbf{k}}, \quad H_{\lambda\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(P_{\lambda\mathbf{k}}^2 + \omega_k^2 Q_{\lambda\mathbf{k}}^2). \quad (4.21)$$

Классические уравнения Гамильтона найденные с использованием (4.21) совпадают, конечно, с (4.20). Таким образом, классическое электромагнитное поле излучения представлено набором независимых гармонических осцилляторов.

4.3 Квантование поля излучения

Мы постулируем, что квантованное поле должно иметь стандартный вид набора осцилляторных нормальных мод, в которых классические переменные $Q_{\lambda\mathbf{k}}$ и $P_{\lambda\mathbf{k}}$ заменены эрмитовскими операторами $\hat{Q}_{\lambda\mathbf{k}}$ и $\hat{P}_{\lambda\mathbf{k}}$ с каноническими коммутационными соотношениями,

$$[\hat{Q}_{\lambda\mathbf{k}}, \hat{Q}_{\lambda'\mathbf{k}'}] = [\hat{P}_{\lambda\mathbf{k}}, \hat{P}_{\lambda'\mathbf{k}'}] = 0, \quad [\hat{Q}_{\lambda\mathbf{k}}, \hat{P}_{\lambda'\mathbf{k}'}] = i\hbar\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (4.22)$$

Амплитуды $b_{\lambda\mathbf{k}}$ и $b_{\lambda\mathbf{k}}^*$ становятся операторами $\hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}$ и $\hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger$, которые взаимно эрмитовски сопряжены. Уравнения (4.19) определяют

$$\hat{b}_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}} \left(\hat{Q}_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{i}{\omega_k} \hat{P}_{\lambda\mathbf{k}} \right), \quad \hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}} \left(\hat{Q}_{\lambda\mathbf{k}} - \frac{i}{\omega_k} \hat{P}_{\lambda\mathbf{k}} \right). \quad (4.23)$$

Коммутационные соотношения этих операторов

$$[\hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}, \hat{b}_{\lambda'\mathbf{k}'}] = [\hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger, \hat{b}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}, \hat{b}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger] = \frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k} \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (4.24)$$

Сравнивая эти результаты с разделом 11.8 первого тома, видим, что можно ввести стандартные операторы рождения и уничтожения квантов

$$\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\omega_k V}{2\pi\hbar c^2}} \hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}, \quad \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger = \sqrt{\frac{\omega_k V}{2\pi\hbar c^2}} \hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger, \quad (4.25)$$

с нормированными коммутаторами

$$[\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}, \hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (4.26)$$

Наша цепочка преобразований заканчивается записыванием квантового гамильтониана в виде

$$\hat{H} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hat{H}_{\lambda\mathbf{k}}, \quad \hat{H}_{\lambda\mathbf{k}} = \frac{V\omega_k^2}{4\pi c^2} (\hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\lambda\mathbf{k}} + \hat{b}_{\lambda\mathbf{k}} \hat{b}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger) = \frac{\hbar\omega_k}{2} (\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} + \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger), \quad (4.27)$$

или используя коммутаторы (4.26),

$$\hat{H}_{\lambda\mathbf{k}} = \hbar\omega_k \left(\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega_k \left(\hat{n}_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.28)$$

Теперь, поле характеризуется операторами $\hat{n}_{\lambda\mathbf{k}}$ - числа квантов, *фотонов* типа $(\lambda\mathbf{k})$. Оператор числа квантов имеет в качестве собственных значений любое неотрицательное целое число.

Окончательное выражение для векторного потенциала (4.2) в терминах квантованных операторов рождения и уничтожения фотонов имеет вид

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}} \left(\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}(t) + \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger(t) \right). \quad (4.29)$$

Зависимость от времени операторов уничтожения даётся (4.5), а у операторов рождения она комплексно сопряжена, как это и должно быть для гейзенберговских операторов в гармонических осцилляторах (см. Т. 1, уравнение 12.60). Соответственно, операторы электрического и магнитного полей равны

$$\hat{\vec{\mathcal{E}}}(\mathbf{r}, t) = -i \sum_{\lambda\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}} \left(\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}(t) - \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger(t) \right), \quad (4.30)$$

и

$$\hat{\vec{B}}(\mathbf{r}, t) = i \sum_{\lambda\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}} \left[\mathbf{k} \times \left(\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}(t) - \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}^\dagger(t) \right) \right]. \quad (4.31)$$

Как для любого гармонического осциллятора, имеется вклад нулевых колебаний: полная энергия *основного состояния*, которое определяется

как *вакуумное* состояние, в котором отсутствуют кванты, все $n_{\lambda\mathbf{k}} = 0$, расходится,

$$E_0 = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \frac{1}{2} \hbar \omega_k. \quad (4.32)$$

Расходимость возникает исключительно из-за бесконечного числа степеней свободы. Для свободного электромагнитного поля эта расходимость несущественна, так как E_0 может быть взята за начало отсчёта энергии. Но, в этом содержится зародыш серьёзных расходимостей, возникающих в квантовой электродинамике и в общей квантовой теории поля, их изменение при взаимодействии полей с веществом является наблюдаемым эффектом.

Задача 4.1

Построить оператор импульса $\hat{\mathbf{P}}$ для свободного электромагнитного поля.

Решение Поток энергии классического поля даётся вектором Пойнтинга,

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}]. \quad (4.33)$$

Полный импульс поля пропорционален интегралу по объёму от вектора Пойнтинга [11], §32,

$$\mathbf{P} = \frac{1}{c^2} \int d^3r \mathbf{S} = \frac{1}{4\pi c} \int d^3r [\vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{B}}]. \quad (4.34)$$

Далее, подставляем локальные поля из (4.30) и (4.31) и интегрируем по объёму, как в (4.9). Вспоминая, что $\omega_k = ck$ получаем

$$\hat{\mathbf{P}} = \frac{1}{c} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hat{H}_{\lambda\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{k} = \sum_{\lambda\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \left(\hat{n}_{\lambda\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.35)$$

Этот результат показывает, что импульс свободного поля сохраняется.

Представления (4.28) и (4.35) находятся в полном согласии с идеей (см. Т.1, раздел 1.3) *фотонов*, как квантов электромагнитного поля, а именно: частиц имеющих нулевую массу покоя и характеризующихся квантовыми числами - волновым вектором и поперечной поляризацией. Энергия и импульс фотона даются выражениями,

$$E_{\lambda\mathbf{k}} = \hbar \omega_k = \hbar ck, \quad \mathbf{p}_{\lambda\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k}. \quad (4.36)$$

Однако, полный импульс поля (4.35) также содержит вклад нулевых колебаний, который исчезает в силу изотропии вакуумного состояния.

В базисе состояний $|\{n_{\lambda\mathbf{k}}\}\rangle$ с определённым числом фотонов операторы векторного потенциала (4.29), электрического поля (4.30) и магнитного поля (4.31) имеют ненулевые матричные элементы только при изменении числа фотонов на $\Delta n = \pm 1$. Диагональные матричные элементы, а следовательно, средние значения по состояниям с определённым числом фотонов равны нулю. Грубо говоря, такие состояния имеют большую неопределённость в фазе поля (см. обсуждение в Т. 1, раздел 12.6) и усреднение по фазе даёт нулевое среднее значение. Для перехода к классическому полю необходимо построить когерентное состояние, см. Т. 1, раздел 12.4.

Задача 4.2

Построить когерентное состояние для фотонной моды ($\lambda\mathbf{k}$) и найти среднеквадратичную флуктуацию линейно поляризованного электрического поля в этом состоянии.

Решение Когерентное состояние $|\alpha\rangle$ есть собственное состояние оператора уничтожения,

$$\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (4.37)$$

Среднее значение электрического вектора поля (4.30) в этом состоянии равно

$$\langle\alpha|\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t)|\alpha\rangle = -i\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}}\left(\alpha e^{i[(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-\omega_k t]} - (\text{c.c.})\right). \quad (4.38)$$

С $\alpha = |\alpha| \exp(i\varphi)$,

$$\langle\alpha|\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t)|\alpha\rangle = -2\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}}|\alpha|\sin\left((\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - \omega_k t + \varphi\right). \quad (4.39)$$

Таким же способом находим

$$\langle\alpha|\hat{\mathcal{E}}^2(\mathbf{r}, t)|\alpha\rangle = \frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}\left\{1 + 4|\alpha|^2 \sin^2\left((\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - \omega_k t + \varphi\right)\right\}. \quad (4.40)$$

Среднеквадратичная флуктуация не зависит ни от координаты, ни от времени, ни от амплитуды α и фазы, ни от поляризации,

$$\sqrt{\langle\Delta\mathcal{E}^2\rangle} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}}. \quad (4.41)$$

Относительная флуктуация, $(\Delta\mathcal{E})^2/\langle\mathcal{E}^2\rangle$, мала для большого числа фотонов $|\alpha|^2$.

Следует также отметить, операторы полей в разных точках пространства-времени в общем случае не коммутируют. Поэтому, они не могут одновременно иметь определённые значения. Как показали *Н. Бор и Л. Розенфельд*, 1933, любые две компоненты $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{B}}$, усреднённые по *одному и тому же* пространственно-временному объёму, всегда измеримы. Для *разных* областей, но которые могут быть связаны световым сигналом, измерение в одной области меняет состояние поля во второй области; тогда и возникает соотношение неопределённостей, которое исчезает в классическом пределе $n \gg 1$, или формально $\hbar \rightarrow 0$.

Задача 4.3

Показать, что операторы поля в двух пространственно-временных точках, (\mathbf{r}, t) и (\mathbf{r}', t') , не коммутируют только если эти точки могут быть связаны световым сигналом,

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = c(t - t'). \quad (4.42)$$

Решение Коммутатор двух декартовых компонент (4.30) электрического поля вычисляется с использованием основных коммутаторов (4.26),

$$[\hat{\mathcal{E}}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\mathcal{E}}_j(\mathbf{r}', t')] = \frac{4\pi i \hbar}{V} \sum_{\lambda \mathbf{k}} e_{\lambda \mathbf{k}}^i e_{\lambda \mathbf{k}}^j \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \omega_k T), \quad (4.43)$$

где в силу трансляционной инвариантности в пространстве и во времени, результат зависит только от разностей $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и $T = t - t'$. Сумма по поляризациям при данном \mathbf{k} не есть условие полноты, так как продольный вектор \mathbf{k}/k в сумме отсутствует. Поэтому

$$\sum_{\lambda} e_{\lambda \mathbf{k}}^i e_{\lambda \mathbf{k}}^j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}. \quad (4.44)$$

С помощью дифференциального оператора

$$\hat{\mathcal{O}}_{ij} = \delta_{ij} \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x'_j}, \quad (4.45)$$

коммутатор (4.43), после перехода к непрерывному пределу $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int V d^3k / (2\pi)^3$, может быть представлен как

$$[\hat{\mathcal{E}}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\mathcal{E}}_j(\mathbf{r}', t')] = -4\pi i \hbar c^2 \hat{\mathcal{O}}_{ij} \Delta(\mathbf{R}, T), \quad (4.46)$$

где введена универсальная функция распространения (пропэгатор)

$$\Delta(\mathbf{R}, T) = \int d^3k \frac{\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \omega_k T)}{\omega_k}. \quad (4.47)$$

Таким же путём можно найти, что коммутатор компонент магнитного поля совпадает с (4.46), в то время как,

$$[\hat{\mathcal{E}}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\mathcal{B}}_j(\mathbf{r}', t')] = -4\pi i \hbar c \varepsilon_{ijl} \frac{\partial}{\partial t'} \frac{\partial}{\partial x_l} \Delta(\mathbf{R}, T). \quad (4.48)$$

Переходя к сферическим координатам, интегрируя по углам \mathbf{k} , записывая интеграл $\int_0^\infty dk$ как $(1/2) \int_{-\infty}^\infty dk$, так как подинтегральная функция чётная, и используя стандартное определение δ -функции, мы получаем

$$\Delta(R, T) = \frac{1}{4\pi c R} [\delta(R - cT) - \delta(R + cT)]. \quad (4.49)$$

Это означает, что поля некоммутативны только в точках на световом конусе, поскольку их измерения не являются независимыми.

4.4 Волновая функция фотона

Наиболее общее одно-фотонное состояние может быть представлено как произвольная суперпозиция операторов рождения действующих на вакуум,

$$|\Phi\rangle = \sum_{\lambda \mathbf{k}} \Phi_{\lambda \mathbf{k}} \hat{a}_{\lambda \mathbf{k}}^\dagger |0\rangle. \quad (4.50)$$

Набор коэффициентов $\Phi_{\lambda \mathbf{k}}$ может быть интерпретирован, как волновая функция фотонного волнового пакета. Состояние может быть нормировано согласно $\sum_{\lambda \mathbf{k}} |\Phi_{\lambda \mathbf{k}}|^2 = 1$.

Электромагнитные поля ассоциированные с таким состоянием фотона определены, как

$$\vec{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t) = \langle 0 | \hat{\vec{\mathcal{E}}}(\mathbf{r}, t) | \Phi \rangle, \quad \vec{\mathcal{B}}(\mathbf{r}, t) = \langle 0 | \hat{\vec{\mathcal{B}}}(\mathbf{r}, t) | \Phi \rangle. \quad (4.51)$$

Эти матричные элементы вычисляются с помощью квантованных полей (4.30), (4.31),

$$\vec{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t) = i \sum_{\lambda \mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi \hbar \omega_k}{V}} \Phi_{\lambda \mathbf{k}} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - i\omega_k t} \equiv i \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi \hbar \omega_k}{V}} \vec{\Phi}(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - i\omega_k t},$$

$$(4.52)$$

и

$$\vec{\mathcal{B}}(\mathbf{r}, t) = i \sum_{\lambda \mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}} \Phi_{\lambda \mathbf{k}} [\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}}] e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - i\omega_k t} \equiv i \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}} [\mathbf{k} \times \vec{\Phi}(\mathbf{k})] e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - i\omega_k t}, \quad (4.53)$$

где введена векторная волновая функция

$$\vec{\Phi}(\mathbf{k}) = \sum_{\lambda} \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} \Phi_{\lambda \mathbf{k}}, \quad (4.54)$$

с очевидным свойством поперечности,

$$(\mathbf{k} \cdot \vec{\Phi}(\mathbf{k})) = 0. \quad (4.55)$$

Вектор поляризации $\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}}$ указывает, как это стандартно принято, направление электрического поля (4.52) в каждой монохроматической компоненте волны.

Задача 4.4

Показать, что вычисленная классически энергия поля, определённого в (4.52) и (4.53) равна

$$E = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega_k (\vec{\Phi}^*(\mathbf{k}) \cdot \vec{\Phi}(\mathbf{k})). \quad (4.56)$$

Векторная волновая функция фотона $\vec{\Phi}(\mathbf{k})$ должна преобразовываться при поворотах, как любая векторная функция, см. Т. 2, разделы 1.2 и 1.3. Здесь, мы работаем в импульсном представлении, так что преобразование поворота, действующее на явную зависимость от переменных, \mathbf{k} в нашем случае, генерируется оператором орбитального момента взятым также в импульсном представлении,

$$\hat{\mathbf{L}} = -i[\mathbf{k} \times \nabla_{\mathbf{k}}]. \quad (4.57)$$

Собственными функциями оператора орбитального момента с определённым значением $\hat{\mathbf{L}}^2 = L(L+1)$ и $\hat{L}_z = m$ (проекция на ось z произвольно фиксированную в пространстве), являются стандартные сферические функции $Y_{Lm}(\mathbf{k})$ зависящие только от углов \mathbf{k} . Кроме этого, векторные

компоненты $\vec{\Phi}$ также преобразуются. Генератором этого преобразования является *спин* фотона определённый в точности так же как и выше (см. Т. 1, раздел 16.2) Это определение отвечает спину $S = 1$, так что оператор полного углового момента равен

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}, \quad (4.58)$$

и возможные значения J - неотрицательные целые числа, $J = L, L \pm 1$.

Задача 4.5

Показать, что состояние $J = 0$ запрещено поперечным характером поля.

Решение Состояние с $J = 0$ - скаляр относительно вращений. Единственная возможность для векторного поля $\vec{\Phi}(\mathbf{k})$ быть инвариантным относительно поворотов, это иметь продольный (радиальный) характер, $\vec{\Phi}(\mathbf{k}) = \mathbf{k}\varphi(k)$. Но, такое поле не удовлетворяет условию (4.55); см. также Т.2, задача 1.14.

Поскольку фотон не имеет системы покоя, невозможно физически разделить орбитальную и спиновую части J , они всегда связаны. Очевидное равенство (см. Т.2, уравнение 6.14),

$$(\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{k}) = 0, \quad (4.59)$$

показывает, что *спиральность* h фотона, проекция полного углового момента на направление движения, равна $(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{k})/k$. Формально, как и положено для спина $S = 1$, этот оператор может иметь собственные значения 0 и ± 1 , но спиральность 0 запрещена условием поперечности. Действительно, роль спина играют векторы поляризации $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}$, которые перпендикулярны \mathbf{k} ; их сферические компоненты (4.15) аналогичны повышающим и понижающим компонентам спина, а продольная компонента отсутствует. В квантовой теории поля доказывается, что любая безмассовая частица со спином S может иметь только два значения спиральности, $h = \pm S$ [12].

4.5 Векторные сферические гармоники

Векторные сферические гармоники являются собственными функциями полного углового момента J . Они отвечают определённым значениям J, L и $J_z = M$ (спин $S = 1$). По этой причине для них используется обозначение $Y_{JLM}(\mathbf{n})$, где векторное сложение организовано обычным образом (см. Т. 2, раздел 7.6),

$$Y_{JLM}(\mathbf{n}) = \sum_{m\sigma} C_{Lm\ 1\sigma}^{JM} Y_{Lm}(\mathbf{n}) \chi_{\sigma}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{k}. \quad (4.60)$$

Здесь, χ_σ - собственные функции спина 1 с проекциями $S_z = \sigma = 0, \pm 1$ на ось квантования. Можно использовать явную форму матриц спина $S = 1$ (см. Т.2, уравнение 1.15), с состояниями представленными трёх-компонентными столбцами (см. Т. 2, уравнение 1.31) или векторами (см. Т. 2, уравнение 1.32), которые сопадают с векторами поляризации \mathbf{e}_σ , $\sigma = 0, \pm 1$. Обычно принято работать со *сферическими векторами*

$$\mathbf{Y}_{JLM}(\mathbf{n}) = \sum_{m\sigma} C_{Lm\ 1\sigma}^{JM} Y_{Lm}(\mathbf{n}) \mathbf{e}_\sigma. \quad (4.61)$$

Для данной величины полного момента J существуют три линейно независимых векторных функций с $L = J, J \pm 1$. Исключение составляет случай $J = 0$, где возможна только одна комбинация

$$\mathbf{Y}_{010}(\mathbf{n}) = \sum_{m\sigma} C_{1m\ 1\sigma}^{00} Y_{1m}(\mathbf{n}) \mathbf{e}_\sigma. \quad (4.62)$$

С коэффициентами Клебша-Гордана из задачи 7.5 во втором томе и сферическими функциями ранга 1, (см. Т. 2, уравнение 1.98) получаем

$$\mathbf{Y}_{010}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\sigma} (-)^{\sigma} Y_{1\sigma}(\mathbf{n}) \mathbf{e}_{-\sigma} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{\sigma} (-)^{\sigma} n_{\sigma} \mathbf{e}_{-\sigma}. \quad (4.63)$$

В естественной системе, с полярной осью вдоль \mathbf{k} остаётся только продольная компонента $\sigma = 0$, $n_{\sigma} = \delta_{\sigma 0}$,

$$\mathbf{Y}_{010}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \mathbf{e}_0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \mathbf{n}. \quad (4.64)$$

Это формальное доказательство утверждения задачи 4.5.

Чётность векторных гармоник даётся чётностью $(-)^L$ сферических функций благодаря их \mathbf{k} -зависимости умноженной ещё на одну минус единицу от векторного состояния, $\Pi = (-)^{L+1}$. Поэтому, для $J = L \pm 1$, чётность равна $(-)^J$, в то время как для $L = J$ чётность равна $(-)^{J+1}$. Продольные состояния принадлежат к первому типу. Соответствующая волновая функция имеет вид $\mathbf{Y}(\mathbf{k}) = \mathbf{k}\Phi(\mathbf{k})$. Так как радиальное поле \mathbf{k} инвариантно относительно вращений, то угловой момент этой функции $J = l$, совпадает с $\Phi(\mathbf{k})$. Полный орбитальный момент, из-за присутствия вектора \mathbf{k} , равен $L = l \pm 1$. Пространственная инверсия даёт $-\mathbf{Y}(-\mathbf{k}) = -(-\mathbf{k}\Phi(-\mathbf{k})) = \mathbf{k}(-)^l\Phi(\mathbf{k})$, то есть чётность равна $(-)^l = (-)^{L+1} = (-)^J$ (первый тип). Но продольное состояние не соответствует реальному фотону. В результате, для каждого $J \neq 0$ имеется два поперечных состояния с противоположной чётностью

(для $J = 0$ нет состояний вообще). В принятой терминологии излучённый фотон с угловым моментом J и чётностью $(-)^J$ называется *электрическим мультиполем* с мультипольностью 2^L , в то время как дополнительный тип с тем же моментом J и чётностью $(-)^{J+1}$ называется *магнитным мультиполем*. Можно напомнить из 0 Т.1, раздела 22.5, что электрические мультипольные операторы $\mathcal{M}(EJ)$ системы зарядов имеют правила отборов по чётности $(-)^J$. А для магнитных мультипольных операторов, $\mathcal{M}(MJ)$, правила отбора по чётности есть $(-)^{J+1}$, что находится в согласии с вышеприведённой классификацией.

Задача 4.6

Используя результаты задачи 16.14, т. 1, доказать что векторы определённые как

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(\text{long})} = \mathbf{n} Y_{JM}, \quad (4.65)$$

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(\text{el})} = \frac{\nabla_{\mathbf{n}}}{\sqrt{J(J+1)}} Y_{JM}, \quad (4.66)$$

где $\nabla_{\mathbf{n}}$ есть угловая часть градиента $\nabla_{\mathbf{k}}$ умноженная на k , и

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(\text{magn})} = [\mathbf{n} \times \mathbf{Y}_{JM}^{(\text{el})}] \quad (4.67)$$

дают общую форму для продольных, электрических и магнитных сферических векторов. Показать, что они ортогональны и нормированы на сфере единичного радиуса,

$$\int d\Omega \mathbf{Y}_{J'M'}^{(\mu')*} \cdot \mathbf{Y}_{JM}^{(\mu)} = \delta_{J'J} \delta_{M'M} \delta_{\mu'\mu}, \quad (4.68)$$

где μ обозначает тип вектора.

Решение Правильные квантовые числа JM следуют из задачи 1.14, Т. 2. Идентификация типа поперечного оператора следует из чётности, $(-)^J$ для электрического типа (4.66) и $(-)^{J+1}$ для магнитного типа (4.67). Ортонормированность проверяется непосредственно, используя интегрирование по частям, там где встречается градиент. При этом возникает $|\nabla_{\mathbf{n}}|^2$ - угловая часть оператора Лапласа умноженная на k^2 . Действуя на Y_{JM} он даёт $J(J+1)Y_{JM}$.

Можно также определять *сферические* волны фотона разлагая экспоненту в выражении для векторного потенциала по сферическим функциям Бесселя. Подробности можно найти в литературе по квантовой электродинамике [10].

4.6 Эффект Казимира

Теперь мы рассмотрим два знаменитых эффекта где квантование электромагнитного поля и наличие вакуумной энергии приводят к важным экспериментальным следствиям.

Энергия нулевых колебаний (4.32), будучи формально бесконечной, зависит от спектра собственных частот электромагнитного поля. Этот спектр, в свою очередь, определяется граничными условиями. До сих пор, мы рассматривали свободное электромагнитное поле в большом вспомогательном объёме V . Но, ничто не мешает использовать этот подход в реальном объёме с физическими границами. Мы всё равно должны найти нормальные моды поля излучения, представить произвольную конфигурацию поля как суперпозицию нормальных мод и объявить коэффициенты суперпозиции операторами рождения и уничтожения. Изменение граничных условий влияет на спектр и, следовательно, на энергию нулевых колебаний. Изменение энергии нулевых колебаний оказывается конечным и может быть измерено экспериментально [13]. Это так называемый *эффект Казимира* [14].

Рассмотрим простейшую геометрию в которой реальные граничные условия накладываются на двух параллельных пластинах расположенных при $x = 0$ и $x = X < 0$. В такой постановке были проведены успешные измерения [15]. Изменение положения X , как мы увидим, меняет энергию нулевых колебаний. Это значит, что существует реальная физическая сила, *сила Казимира*, действующая между двумя пластинами и зависящая от расстояния между ними. Для простоты, мы предполагаем, что пластины из идеального металла с нулевыми граничными условиями для электрического поля. Нормальными модами являются плоские волны с волновым вектором \mathbf{q} вдоль yz -плоскости и стоячие волны $\propto \sin(kx)$ между пластинами, где волновое число k квантовано,

$$k \Rightarrow k_n = \frac{\pi}{X} n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.69)$$

Волновое уравнение (4.4) определяет спектр частот зависящих от расстояния X .

$$\omega_n(\mathbf{q}) = c\sqrt{\mathbf{q}^2 + (\pi n/X)^2}. \quad (4.70)$$

Предполагая, что внутри резонатора вакуумное состояние поля (нет реальных квантов, температура $T = 0$), мы находим силу действующую между пластинами, как градиент энергии нулевых колебаний,

$$F = -\frac{\partial E_0}{\partial X} = -\frac{\hbar}{2} \sum \frac{\partial \omega}{\partial X}. \quad (4.71)$$

В этом выражении сумма идёт по всем квантовым числам мод включая поляризацию λ (фактор 2), двумерный вектор \mathbf{q} и квантовое число n волнового вектора (4.69). Для вектора \mathbf{q} мы предполагаем стандартные искусственные граничные условия на границах большой площади пластин S , так что $\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow S d^2 q / (2\pi)^2$. Наблюдаемой величиной является *давление*, сила на единицу площади пластин,

$$P = \frac{F}{S} = -2 \frac{\hbar}{2} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \sum_n \frac{\partial \omega_n(\mathbf{q})}{\partial X} = \frac{\hbar c^2}{4X^3} \sum_n n^2 \int \frac{d^2 q}{\omega_n(\mathbf{q})}. \quad (4.72)$$

Используя

$$d^2 q = 2\pi q dq = \frac{2\pi\omega}{c^2} d\omega, \quad (4.73)$$

мы приходим к

$$P = \frac{\pi\hbar}{2X^3} \sum_{n=1} n^2 \int_{\omega_n^{(\min)}}^{\infty} d\omega, \quad \omega_n^{(\min)} = \frac{\pi c n}{X}. \quad (4.74)$$

Сумма по нормальным модам в (4.74) расходится. Но в реальности, при очень высоких частотах, металл становится прозрачным и волны распространяются как вакууме, не замечая стенок, так что нормальные моды перестают зависеть от X . Конечный ответ для давления получится если сравнить наш со случаем отсутствия пластин ($X \rightarrow \infty$). В этом случае нет условия квантования (4.69) и переменная n становится непрерывной, так что при $X \rightarrow \infty$,

$$P_0 = \frac{\pi\hbar}{2X^3} \int_0^{\infty} dn n^2 \int_{\omega_n^{(\min)}}^{\infty} d\omega. \quad (4.75)$$

Задача 4.7

Показать, что вакуумное давление (4.75) может быть интерпретировано, как результат отражения свободных фотонов от пластины с изменением знак импульса фотонов.

$$P_0 = \sum_{\lambda} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} n_{\lambda \mathbf{k}} v_x 2\hbar k_x, \quad (4.76)$$

где $n_{\mathbf{k}}$ - плотность фотонов ($= 1/2$ для всех мод в нашем случае) и $v_x = c^2 k_x / \omega_k$.

Наблюдаемой величиной является дополнительное притяжение на единицу площади,

$$P_0 - P = -\frac{\pi\hbar}{2X^3} \left[\sum_{n=1}^{\infty} - \int_0^{\infty} dn \right] n^2 \int_{\omega_n^{(\min)}}^{\infty} d\omega. \quad (4.77)$$

Дополнительная сила возникает от низких частот, когда длина волны поперечных волн порядка расстояния между пластинами. Вклады высоких частот сокращаются, так как проводник и вакуум одинаково прозрачны для этих частот.

Чтобы вычислить разность (4.77) мы воспользуемся *формулой суммирования Эйлера-Маклорена* для плавной функции $f(n)$, вывод которой см. ниже,

$$\sum_{n=1}^{\infty} f(n) - \int_0^{\infty} dn f(n) = -\frac{1}{2}f(0) - \frac{1}{12}f'(0) + \frac{1}{720}f'''(0) \dots \quad (4.78)$$

В нашем случае (4.77) члены $f(0)$ и $f'(0)$ исчезают и ненулевой вклад идёт от $f'''(0) = -6\pi/X$ (не забудьте продифференцировать нижний предел интеграла). Это даёт окончательный результат для сил Казимира на больших расстояниях,

$$P_0 - P = \frac{\pi^2\hbar c}{240X^4}. \quad (4.79)$$

Теория и экспериментальные подробности эффекта Казимира обсуждаются в [16].

4.7 Формула суммирования Эйлера-Маклорена

Мы следуем процедуре, которая может быть полезной в численном вычислении интегралов $\int_a^b f(x) dx$ от гладких функции $f(x)$. В качестве опорного базиса мы введем набор полиномов специального вида (связанных с *полиномами Бернулли*) $F_n(X)$, которые определяются рекуррентным соотношением

$$\frac{dF_n(x)}{dx} = F_{n-1}(x), \quad (4.80)$$

вместе с дополнительным условием, которое фиксирует произвольную постоянную допускаемую в F_n в соответствии с (4.80): мы предполагаем

4.7 Формула суммирования Эйлера-Маклорена

93

что функции F_n , $n > 0$, имеют нулевое среднее значение на интервале (a, b) нашего интегрирования,

$$\int_a^b dx F_n(x) = 0, \quad n > 0. \quad (4.81)$$

Начиная с $F_0 = 1$, мы находим

$$F_1(x) = x - \frac{a+b}{2}, \quad (4.82)$$

$$F_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{a+b}{2}x + \frac{a^2+b^2+4ab}{12}, \quad (4.83)$$

$$F_3(x) = \frac{1}{6}x^3 - \frac{a+b}{4}x^2 + \frac{a^2+b^2+4ab}{12}x - \frac{ab(a+b)}{12} = \frac{1}{6}(x-a)(x-b) \left(x - \frac{a+b}{2} \right), \quad (4.84)$$

$$F_4(x) = \frac{1}{24}x^4 - \frac{a+b}{12}x^3 + \frac{a^2+b^2+4ab}{24}x^2 - \frac{ab(a+b)}{12}x - \frac{(a-b)^4 - 30a^2b^2}{720}, \quad \dots \quad (4.85)$$

Значения этих функций на концах интервала равны:

$$\begin{aligned} F_1(a) = -F_1(b) &= -\frac{a-b}{2}, \quad F_2(a) = F_2(b) = \frac{(a-b)^2}{12}, \\ F_3(a) = F_3(b) &= 0, \quad F_4(a) = F_4(b) = -\frac{(a-b)^4}{720}; \end{aligned} \quad (4.86)$$

в силу условия нормировки (4.81), $F_n(a) = F_n(b)$ для $n > 1$.

Используя интегрирование по частям, мы можем записать

$$\int_a^b dx f(x) \equiv \int_a^b dx F_0 f = \int_a^b dx F_1' f = \left[F_1 f \right]_a^b - \int_a^b dx F_1 f'. \quad (4.87)$$

Этот процесс можно продолжать вовлекая новые функции (4.80):

$$\int_a^b dx f = \left[F_1 f - F_2 f' + F_3 f'' - F_4 f''' \right]_a^b + \int_a^b dx F_4 f'''' , \quad (4.88)$$

и так далее. Рассмотрим интервал $a = 0$ и $b = 1$. Тогда первый вклад даёт

$$\left[F_1 f \right]_0^1 = \frac{1}{2}[f(1) + f(0)], \quad (4.89)$$

так что

$$\int_0^1 dx f(x) = \frac{1}{2}[f(1)+f(0)] - \frac{1}{12}[f'(1)-f'(0)] + \frac{1}{720}[f'''(1)-f'''(0)] + \int_a^b dx F_4 f'''' . \quad (4.90)$$

Если интервал интегрирования разделён на малые равные части, что обычно делается в процессе численного интегрирования, операцию (4.87) можно проделать для каждой части, а затем сложить результаты. В членах с производными $f(x)$, все вклады в промежуточных точках сокращаются, потому что краевые значения опорных функций одинаковы для всех интервалов. Если $b \rightarrow \infty$ и $f(x)$ пренебрежимо мала при больших x , как это имеет место в случае (4.77), мы идем через целые точки и получаем

$$\int_0^\infty dx f(x) = \frac{1}{2}f(0) + \sum_{n=1}^\infty f(n) + \frac{1}{12}f'(0) - \frac{1}{720}f'''(0) + \int_0^\infty dx F_4 f'''' , \quad (4.91)$$

или, если мы хотим приближённо заменить сумму интегралом

$$\sum_{n=1}^\infty f(n) = \int_0^\infty dx f(x) - \frac{1}{2}f(0) - \frac{1}{12}f'(0) + \frac{1}{720}f'''(0) \dots \quad (4.92)$$

Если остаточный интегральный член в (4.91) пренебрежимо мал, мы приходим к формуле Эйлера-Маклорена (4.78). Дальнейшее разложение пойдет по нечетным производным и следующий член равен $-f''''(0)/30240$.

4.8 Лэмбовский сдвиг

Атом водорода является единственной системой, которая имеет точное решение нерелятивистского уравнения Шредингера, а также релятивистского уравнения Дирака (для точечного протона). Здесь, нельзя списать расхождение между теорией и экспериментом на приближенный характер вычислений. Надежно установленное расхождение свидетельствует о наличии новых физических явлений.

Как мы знаем из Т. 2, раздел 8.3, электронные уровни $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ в атоме водорода остаются вырожденными даже с учетом тонкой структуры. В некоторых экспериментах, проведенных в 1930-х годах, были обнаружены указания, что уровень $2s_{1/2}$ находится выше $2p_{1/2}$ примерно 0.03 см^{-1} . Однако соответствующий переход находится в радиочастотном диапазоне. В то время, точные измерения в этом диапазоне были недоступны.

Только в 1947 году, после успехов в развитии техники радаров, точные радио-спектроскопические измерения Лэмба и Ризерфорда [17] установили существование сдвига

$$\delta E_2 \equiv E(2s_{1/2}) - E(2p_{1/2}) = 0.034 \text{ cm}^{-1} = 1057.8 \text{ MHz}. \quad (4.93)$$

Этот сдвиг, равный примерно 0,1 от тонкого расщепления между $2p_{3/2}$ и $2p_{1/2}$ уровнями, называется *Лэмбовский* или радиационный сдвиг. Он растёт *propto* Z^4 в более тяжёлых водородоподобных ионах.

Открытие Лэмбовского сдвига сыграло исторически важную роль являясь, по сути первым указанием на нетривиальный характер *физического вакуума*, как фактического основного состояния поля излучения. В соответствии с объяснением, данным Г. Бете, Лэмбовский сдвиг обусловлен нулевыми колебаниями электромагнитного поля, которые создают, в дополнение к кулоновскому полю ядра, флуктуирующее поле влияющее на атомный электрон. Физический вакуум (состояние, без реальных квантов) имеет определенные наблюдаемые свойства, как мы уже видели, хотя и при наличии материи, в эффекте Казимира. Открытие и теория Лэмбовского сдвига дали мощный импульс для развития *квантовой электродинамики*, наиболее точной ветви современной физики.

Не вдаваясь в формализм квантовой электродинамики, мы приводим ниже полу-качественную оценку лэмбовского сдвига непосредственно основанную на действии флуктуирующего электрического поля $\vec{\mathcal{E}}_\omega$ на электрон. Для легких атомов ($Z\alpha \ll 1$) и, поэтому, для нерелятивистских электронов ($v/c \sim Z\alpha$), и можно пренебречь магнитным полем $\vec{\mathcal{B}}_\omega$. Квантованное электрическое поле создает и уничтожает виртуальные фотоны и приводит к дополнительному смещению электронов. Среднее значение электрического поля в вакуумном состоянии исчезает, но его средний квадрат, в соответствии с (4.30), равен

$$\langle \vec{\mathcal{E}}_\omega^2 \rangle = \frac{2\pi\hbar\omega}{V}, \quad (4.94)$$

что соответствует половине нулевой энергии данной моды, $\langle \vec{\mathcal{E}}_\omega^2 \rangle (V/8\pi) = \hbar\omega/4$.

Флуктуационное смещение $\vec{\xi}$ электрона подчиняется уравнению движения

$$m\ddot{\vec{\xi}} = e\vec{\mathcal{E}}. \quad (4.95)$$

Только моды с длиной волны больше, чем типичное смещение ξ ,

$$k\xi \ll 1, \quad (4.96)$$

могут дать существенный вклад. В противном случае эффект от различных областей флуктуационного поля сокращается. Поэтому поле $\vec{\mathcal{E}}$ в уравнении (4.95) можно считать однородным, и для временной компоненты Фурье получаем

$$-m\omega^2\vec{\xi}_\omega = e\vec{\mathcal{E}}_\omega. \quad (4.97)$$

Среднее значение смещения, $\langle\vec{\xi}_\omega\rangle$, исчезает, и мы находим для среднего квадрата флуктуации

$$\langle\vec{\xi}_\omega^2\rangle = \frac{e^2}{m^2\omega^4}\langle\vec{\mathcal{E}}_\omega^2\rangle = \frac{2\pi\hbar e^2}{Vm^2\omega^3}. \quad (4.98)$$

вклады различных мод поля некогерентны, так что полный средний квадрат смещения определяется суммой по модам с плотностью состояний $\rho(\omega)$ найденной в Т. 1, уравнение 3.92,

$$\langle\vec{\xi}^2\rangle = \int d\omega \rho(\omega)\langle\vec{\xi}_\omega^2\rangle = \int \langle\vec{\xi}_\omega^2\rangle \frac{V\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} = \frac{2\hbar e^2}{\pi m^2 c^3} \int \frac{d\omega}{\omega}. \quad (4.99)$$

Хотя результат формально расходящийся, нет реальной физической расходимости, так как есть факторы, обеспечивающие фактическое обрезание. Большие частоты не дают вклада из-за релятивистского роста инерции электронов. Частоты малые по сравнению с энергией первого возбуждения (которая того же порядка величины, что и энергия связи E_b) дают малый вклад в теории возмущений. Поэтому мы можем оценить пределы в интеграле (4.99) как

$$\hbar\omega_{\max} \sim mc^2, \quad \hbar\omega_{\min} \sim E_b \sim (Z\alpha)^2 mc^2. \quad (4.100)$$

Во всяком случае, интеграл (4.98) только слабо, логарифмически, зависит от этих пределов.

Таким образом,

$$\langle\vec{\xi}^2\rangle = \frac{2\hbar e^2}{\pi m^2 c^3} \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}} = \frac{2\hbar e^2}{\pi m^2 c^3} \ln \frac{b}{(Z\alpha)^2}, \quad (4.101)$$

где b это число порядка единицы. Основной фактор в полученной амплитуде дрожания электрона мал по сравнению с размером орбиты a и даже по сравнению с комптоновской длиной волны λ_C ,

$$\langle\vec{\xi}^2\rangle \sim \frac{\hbar e^2}{m^2 c^3} \sim \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 = \alpha \lambda_C^2 \sim \alpha^3 a^2 \sim 10^{-6} a^2. \quad (4.102)$$

В соответствии с оценкой в ω_{\max} , только поля осцилляторов с $\hbar k < mc$, или с длиной волны $\lambda \sim 1/k > \hbar/mc = \lambda_C$ являются эффективными. Это показывает, что предполагаемое, неравенство (4.96) выполняется,

$$k\xi \sim ka\alpha^{3/2} < \frac{a}{\lambda_C} \alpha^{3/2} = \sqrt{\alpha} \ll 1. \quad (4.103)$$

Усредняя потенциал, действующий на электрон по этим флуктуациям, мы получаем, как и в разделе 8.3, Т.2, для дарвиновского члена,

$$\overline{U(\mathbf{r} + \vec{\xi})} \approx U(\mathbf{r}) + \frac{1}{6} \langle \xi^2 \rangle \nabla^2 U(\mathbf{r}). \quad (4.104)$$

В первом порядке, сдвиг уровня $|n\ell\rangle$ для водородоподобных атомов можно определить с помощью (4.101),

$$\delta E_{n\ell} = \frac{1}{6} \langle \xi^2 \rangle \langle \nabla^2 U(\mathbf{r}) \rangle_{n\ell} = \frac{\alpha^3 a^2}{3\pi} \ln \frac{b}{(Z\alpha)^2} \langle \nabla^2 U(\mathbf{r}) \rangle_{n\ell}. \quad (4.105)$$

В кулоновском поле

$$U = -\frac{Ze^2}{r} \rightsquigarrow \nabla^2 U = 4\pi Ze^2 \delta(\mathbf{r}), \quad (4.106)$$

так что

$$\langle \nabla^2 U(\mathbf{r}) \rangle_{n\ell} = \int d^3r |\psi_{n\ell}|^2 \nabla^2 U = 4\pi Ze^2 |\psi_{n\ell}(0)|^2. \quad (4.107)$$

В этом приближении сдвиг существует только для s -состояний, которые смещены вверх от партнерских p -состояний, рис. 4.1.

Для $\ell = 0$,

$$|\psi_{n0}|^2 = \frac{Z^3}{\pi a^3 n^3}, \quad (4.108)$$

и сдвиг быстро убывает с ростом n ,

$$\delta E_n = \frac{\alpha^3 a^2}{3\pi} \frac{4\pi Z^4 e^2}{\pi a^3 n^3} \ln \frac{b}{(Z\alpha)^2}. \quad (4.109)$$

в частности, для атома водорода,

$$\delta E_n = \frac{4}{3\pi} \alpha^3 \frac{e^2}{a^2 n^2} \frac{1}{n} \ln \frac{b}{\alpha^2} \sim \frac{\alpha^3}{n} \ln \frac{b}{\alpha^2} E_n. \quad (4.110)$$

Этот сдвиг содержит лишнюю степень α по сравнению с тонкой структурой (см. Т.2, раздел 8.42), но из-за большого логарифма $\ln(\alpha^{-2})$ сдвиг δE всего в 10 (а не 100) раз меньше. Расчет КЭД [10] определяет точное значение постоянной b , а также другие поправки и приводит к хорошему согласию с экспериментом. Для уровней $\ell = 1$, сдвиг на два порядка величины меньше, чем для $\ell = 0$.



Рис. 4.1. Схема уровней для лэмбовского сдвига.

4.9 Взаимодействие излучения с веществом

В нерелятивистской теории взаимодействие с электромагнитным полем включается по *минимальному принципу*: как и в разделе 13, Т.1, мы начнем с гамильтониана частицы с зарядом e и сделаем минимальную подстановку

$$\mathbf{p} \Rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad H \rightarrow H - e\varphi(\mathbf{r}), \quad (4.111)$$

где поле описывается потенциалов φ и \mathbf{A} . Мы знаем, что результирующая теория *калибровочно инвариантна*. В современной релятивистской теории, ситуация обратная [12], требование калибровочной инвариантности определяет форму взаимодействия.

Для поля излучения в калибровке (4.1), гамильтониан взаимодействия имеет вид

$$\hat{H}' = \hat{H}'_1 + \hat{H}'_2 + \hat{H}'_s, \quad (4.112)$$

где три члена (два орбитальных и один спиновый член), похожи на то, что было рассмотрено в разделе 13, т.1 для классического внешнего поля:

$$\hat{H}'_1 = - \sum_a \frac{e_a}{2m_a c} \left(\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_a) + \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a \right) = - \sum_a \frac{e_a}{m_a c} \left(\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_a) \right), \quad (4.113)$$

где мы напомнили, что в поперечной калибровке (4.1) $(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})) = (\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{p}})$;

$$\hat{H}'_2 = \sum_a \frac{e_a^2}{2m_a c^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}_a), \quad (4.114)$$

and

$$\hat{H}'_s = - \sum_a \hbar g_a^s \hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_a). \quad (4.115)$$

Здесь g_a^s - гиромагнитное отношение частицы, которое не предсказывается принципом минимального включения взаимодействия из-за возможных эффектов сильного взаимодействия.

Разница по сравнению со случаем внешнего поля в операторном характере поля. Это приводит к процессам с *изменением числа* квантов. Члены H'_1 и H'_s меняют число фотонов на ± 1 и отвечают за излучение или поглощение квантов. Член H'_2 имеет правила отбора $\Delta n = \pm 2$ или 0. Он ответственен за двухфотонные переходы или рассеяние света, излучение с последующим поглощением или наоборот. В процессах рассеяния также разрешено двойное применение однократных процессов (второй порядок). Запишем в явном виде матричные элементы для нескольких типичных физических процессов, рис. 4.2, в первом порядке по \hat{H}' :

a. излучение фотона в моде $(\lambda \mathbf{k})$ с переходом системы из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$,

$$\langle n_{\lambda \mathbf{k}} + 1; f | \hat{H}'_1 | n_{\lambda \mathbf{k}}; i \rangle = -\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} (n_{\lambda \mathbf{k}} + 1) \langle f | \sum_a \frac{e_a}{m_a} (\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}}^*) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} | i \rangle; \quad (4.116)$$

b. поглощение системой фотона $(\lambda \mathbf{k})$ с переходом $i \rightarrow f$,

$$\langle n_{\lambda \mathbf{k}} - 1; f | \hat{H}'_1 | n_{\lambda \mathbf{k}}; i \rangle = -\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} n_{\lambda \mathbf{k}} \langle f | \sum_a \frac{e_a}{m_a} (\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} | i \rangle; \quad (4.117)$$

с. двух-фотонный переход $i \rightarrow f$ с излучением кванта $(\lambda \mathbf{k} \neq \lambda' \mathbf{k}')$,

$$\begin{aligned} & \langle n_{\lambda \mathbf{k}} + 1, n_{\lambda' \mathbf{k}'} + 1; f | \hat{H}'_2 | n_{\lambda \mathbf{k}}, n_{\lambda' \mathbf{k}'}; i \rangle \\ &= 2 \frac{\pi\hbar}{V \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \sqrt{(n_{\lambda \mathbf{k}} + 1)(n_{\lambda' \mathbf{k}'} + 1)} (\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}}^* \cdot \mathbf{e}_{\lambda' \mathbf{k}'}^*) \langle f | \sum_a \frac{e_a^2}{m_a} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_a} | i \rangle, \end{aligned} \quad (4.118)$$

где фактор 2 возникает из-за двух эквивалентных операторов $\hat{\mathbf{A}}$;

d. поглощение квантов $(\lambda \mathbf{k})$ и излучение квантов $(\lambda' \mathbf{k}')$ с переходом системы $i \rightarrow f$ (рассеяние электромагнитной волны),

$$\begin{aligned} & \langle n_{\lambda \mathbf{k}} - 1, n_{\lambda' \mathbf{k}'} + 1; f | \hat{H}'_2 | n_{\lambda \mathbf{k}}, n_{\lambda' \mathbf{k}'}; i \rangle \\ &= 2 \frac{\pi\hbar}{V \sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \sqrt{(n_{\lambda' \mathbf{k}'} + 1)n_{\lambda \mathbf{k}}} (\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} \cdot \mathbf{e}_{\lambda' \mathbf{k}'}^*) \langle f | \sum_a \frac{e_a^2}{m_a} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_a} | i \rangle; \end{aligned} \quad (4.119)$$

Похожие события рассеяния также генерируются во втором порядке оператором \hat{H}_1 . Зависимость от времени гейзенберговских операторов была

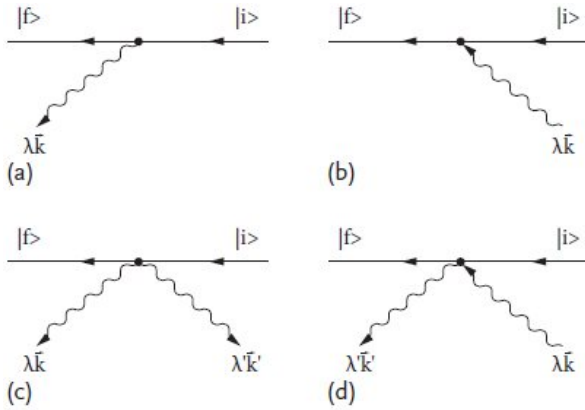


Рис. 4.2. Типичные диаграммы для электромагнитных процессов.

опущена так как она будет учитываться при использовании золотого правила для вероятности перехода.

Если бы эти процессы происходили со свободными заряженными частицами, их начальное и конечное состояние было бы плоская волна с импульсами \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_f соответственно. Тогда, матричные элементы будут содержать δ -функции, выражающие сохранение импульса,

$$a. \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i + \hbar\mathbf{k}); \quad b. \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i - \hbar\mathbf{k});$$

$$c. \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i + \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{k}'); \quad d. \delta(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i + \hbar\mathbf{k}' - \hbar\mathbf{k});$$

Для системы многих тел сохраняющейся величиной является суммарный импульс всех частиц. Но, в реальных процессах также должна сохраняться полная энергия, как подразумевается по золотому правилу. Для *свободной частицы* два закона сохранения не могут быть выполнены одновременно. Поэтому излучение и поглощение света свободной частицы (без изменения его массы) запрещены, они могут иметь место только *виртуально* как часть более сложного процесса; это будет видно при обсуждении фотоэффекта, в разделе 5.8. Рассеяние света, процесс *d* (4.119), также возможен для свободного заряда, (*томсоновское рассеяние* в нерелятивистском случае или *эффект Комптона* в релятивистском случае). Мы обсудим его более подробно в гл. 6.

Неисчислимо количество
электрических частиц колеблются в
каждом языке пламени и источнике
света.

П. Зееман, *Нобелевская лекция, 1903*

Глава 5

Излучение и поглощение фотонов

5.1 Коэффициенты Эйнштейна; мазеры и лазеры

Зависящее от времени электромагнитное поле может передавать энергию системе зарядов возбуждая систему (*поглощение* света). Тоже поле способно принимать энергию от системы (*индуцированное*, или *вынужденное излучение*). Возбужденная система также может излучать энергию в виде фотонов без стимуляции реальным квантом (*спонтанное излучение*). Все эти процессы описываются гамильтонианом (4.107) взаимодействия между полем излучения и вещества.

В результате поглощения и испускания фотонов атомами среды, Система может прибыть в состояние *термодинамического равновесия*. Равновесие, как для атомов так и для фотонов, достигается для каждой возможной в среде частоты перехода ω . В равновесии мы имеем стационарную заселённость атомов N_i в каждом квантовом состоянии $|i\rangle$ и стационарное распределение фотонов с плотностью энергии $\rho(\omega)$ для частоты ω . Следуя А. Эйнштейну, 1917, рассмотрим условия равновесия.

Поглощая фотон с частотой ω , атом выполняет квантовый переход $i \rightarrow f$ в состояние $|f\rangle$ с энергией $E_f = E_i + \hbar\omega$. Скорость процесса поглощения должна быть пропорциональна числу имеющихся атомов в исходном состоянии i и числу подходящих фотонов,

$$\dot{w}_{fi} = B_{fi} N_i \rho(\omega_{fi}), \quad (5.1)$$

где B_{fi} является *коэффициентом Эйнштейна*. Параллельно с этим, идут также и обратные переходы $f \rightarrow i$ с излучением фотонов с той же частотой. Скорость излучения содержит индуцированный член, пропорциональный числу атомов в состоянии $|f\rangle$ и количеству уже доступных фотонов, и спонтанное излучение, которое не зависит от состояния фотонов и определяется

только структурой атома,

$$\dot{\omega}_{if} = B_{if} N_f \rho(\omega_{fi}) + A_{if} N_f, \quad (5.2)$$

где введены ещё два коэффициента, B_{if} и A_{if} .

По очевидному смыслу, коэффициенты Эйнштейна являются скоростями перехода в *элементарных актах* поглощения или излучения. Амплитуды этих процессов были найдены в теории возмущений (1.12),

$$a_{i \rightarrow f} = -\frac{i}{\hbar} \int dt H'_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t}, \quad a_{f \rightarrow i} = -\frac{i}{\hbar} \int dt H'_{if}(t) e^{i\omega_{if}t}. \quad (5.3)$$

Так как $\omega_{fi} = -\omega_{if}$, и гамильтониан эрмитов, $H'_{fi} = (H'_{if})^*$, мы находим соотношение между амплитудами,

$$a_{i \rightarrow f} = -a_{f \rightarrow i}^*. \quad (5.4)$$

Таким образом, *вероятности* прямых и обратных процессов отличаются только на плотность конечных состояний (*принцип детального равновесия*, который будет вновь обсуждаться в теории рассеяния, раздел 10.3). Он также, справедлив вне теории возмущений, как можно видеть, например, из второго порядка амплитуды (1.27) или полное выражение (1.31). Конечная плотность состояний включена в определение коэффициентов Эйнштейна, так что детальное равновесие требует

$$B_{fi} = B_{if}. \quad (5.5)$$

Условие равновесия есть равенство скоростей, $\dot{\omega}_{fi} = \dot{\omega}_{if}$, и, вместе с (5.5), это даёт уравнение для равновесной плотности фотонов,

$$\rho(\omega_{fi}) = \frac{A_{if}}{B_{if}} \frac{1}{(N_i/N_f) - 1}. \quad (5.6)$$

Статистическая механика предсказывает, что в тепловом равновесии при температуре T (мы измеряем температуру в энергетических единицах, полагая *постоянную Больцмана* $k_B = 1$) заселённость атомного состояния с энергией E пропорциональна $\exp(-E/T)$. Поэтому в равновесии

$$\frac{N_i}{N_f} = e^{-(E_i - E_f)/T} = e^{\hbar\omega_{fi}/T}. \quad (5.7)$$

Применяя тот же принцип Больцмана к фотонному газу, мы получаем равновесное число \bar{n} фотонов данной моды ($\lambda \mathbf{k}$) с частотой ω ,

$$\bar{n} = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha(n+1/2)} n, \quad \alpha = \frac{\hbar\omega}{T}, \quad (5.8)$$

где *статистическая сумма* есть нормировочный множитель,

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha(n+1/2)}. \quad (5.9)$$

Простое суммирование геометрической прогрессии ведёт к *распределению Планка* для числа фотонов данного сорта,

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\alpha} - 1} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/T) - 1}. \quad (5.10)$$

С плотностью фотонных состояний на единичный интервал энергии (1.3.92), мы находим

$$\rho(\omega) = \frac{V\omega^2}{\pi^2\hbar c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/T) - 1}, \quad (5.11)$$

и уравнение (5.6) определяет соотношение между коэффициентами Эйнштейна coefficients,

$$\frac{A_{if}}{B_{if}} = \frac{V\omega_{fi}^2}{\pi^2\hbar c^3}. \quad (5.12)$$

Мы видим, что этот результат, полученный до развития квантовой механики полностью подтверждается квантовой теорией.

В присутствии электромагнитной волны, все три процесса, поглощение, спонтанное и вынужденное излучение, происходят одновременно в системе. Таким путём устанавливается равновесие между веществом и излучением. Изменение интенсивности волны с большим средним числом квантов \bar{n} при прохождении в среде определяется конкуренцией индуцированного излучения и поглощения. Вероятности обоих процессов пропорциональны доступному числу фотонов, то есть интенсивности волны I и заселённостью атомов в квантовом состоянии, которое необходимо для начала перехода. Для данного перехода между двумя состояниями атомов, интенсивность волны растёт пропорционально $N_{>}$, числу атомов в верхнем состоянии, и интенсивность уменьшаются пропорционально $N_{<}$, числу атомов в нижнем состоянии, способных поглощать кванты. Соотношения Эйнштейна позволяют записать баланс простым образом,

$$\frac{dI}{dx} = \text{const} \cdot I(N_{>} - N_{<}). \quad (5.13)$$

Проходящая волна может быть *усилена* средой, если $N_> > N_<$. Нормально, равновесные заселённости уровней падают с энергией уровня, см. (5.7). Например, для видимого света при комнатной температуре $(\hbar\omega/T) \approx 10^2$, и $N_> \ll N_<$. Поэтому, необходимо создавать *инверсную заселённость*.

Квантовые приборы создающие инверсную заселенность энергетических уровней позволяют получить генерацию и усиление электромагнитных волн с уникальным сочетанием высокой мощности, монохроматичности, когерентности и малого углового разброса. В зависимости от диапазона частот, эти устройства называется *мазеры* или *лазеры*, от сокращений *Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation* или *Light Amplification* ..., соответственно. В формальном смысле, можно сказать, что среда с инверсной заселённостью имеет *отрицательную температуру* относительно излучения данной частоты. Обсуждение современных устройств квантовой оптики находится за пределами рамок нашей лекции. Приведем только несколько простых примеров.

Оригинальный способ генерации отрицательных температур был использован в *молекулярном генераторе* на молекулах аммиака. Специальное устройство отклоняло от молекулярного пучка молекулы на более низком уровне. В оставшемся пучке тогда мы имеем $N_> > N_<$. Конечно, время жизни верхнего уровня относительно *спонтанного излучения* должно быть достаточно большим. Приготовленный пучок с инверсной заселённостью доходит до резонаторной полости с собственной частотой резонанса $\omega_0 = (E_> - E_<)/\hbar$. Тепловое излучение с той же частотой, что всегда присутствует в полости, индуцирует излучение фотонов молекулами пучка, которые, в свою очередь, усиливают собственную моду резонатора. Часть энергии может быть использована, в то время как оставшаяся часть действует на новые входящие молекулы стимулируя новое излучение, что обеспечивает высокую стабильность генерируемых частот.

В лазерах нет такого сортирующего устройства. Хорошо известной схемой работы является схема на основе *трех уровней*, рис. 5.1. В равновесии, наибольшее число атомов находится в состоянии 1. Внешнее поле с частотой ω_{31} , *оптической накачки*, возбуждает атомы до уровня 3. Если скорость перехода \dot{w}_{23} перехода $3 \rightarrow 2$ высока по сравнению с \dot{w}_{13} , по истечении времени $\tau_3 \sim \dot{w}_{23}^{-1}$ атомы будут испытывать переход на уровень 2. Состояние 2 должно быть *метастабильным* (долгоживущим, $\tau_2 \sim \dot{w}_{12}^{-1} \gg \tau_3$). Таким образом, мы накапливаем атомы в состояние 2. При высокой мощности накачки, можно достичь долгоживущую инверсную заселённость для пары уровней 1 и 2, $N_2 > N_1$. Типичные значения могут быть $\tau_{au3} \sim 10^{-(7 \div 8)}$; хорошо иметь широкий уровень 3, который помогает

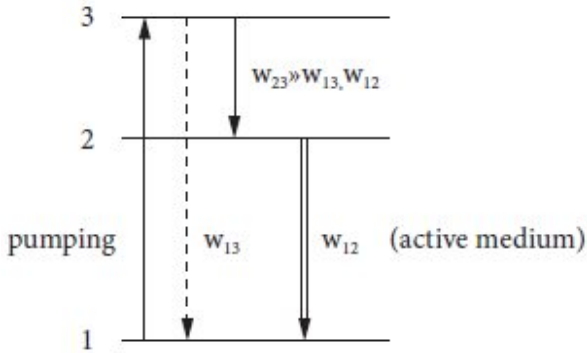


Рис. 5.1. Трёхуровневая лазерная система

получить интенсивную накачки $1 \rightarrow 3$. Спонтанное излучение $2 \rightarrow 1$ порождает волну требуемой частоты ω_{12} . Распространяясь вдоль среды, эта волна стимулирует излучение других атомов в состоянии 2. Множественные отражения от зеркал, заменяющих резонаторную полость для оптических частот $\lambda \sim 5 \cdot 10^{-5}$ см, усиливают волну из-за индуцированного излучения. Если усиление превосходит потери на отражение, интенсивность растет как лавина. Одно из зеркал является полупрозрачным для излучения выходящего наружу. Волны, распространяющиеся не точно по оси, испытывают меньшее число отражений и имеют меньше времени для усиления, что приводит к малому угловому разбросу основного излучения. Таким образом, лазеры преобразуют энергию накачки с относительно широким разбросом частот на монохроматическое излучение частоты ω_{21} . Трёхуровневая схема используется, например, в широко известном рубиновом лазере, где переходы примесных атомов хрома дают красную линию 694,3 нм.

Новые эффекты появляются при высокой плотности фотонов в лазерном пучке. Например, вполне вероятно иметь одновременное взаимодействие двух фотонов с тем же атомом. Если их суммарная энергия удовлетворяет условию резонанса,

$$\omega_1 + \omega_2 = \omega_{fi}, \quad (5.14)$$

возможно поглощение с двухфотонного переходом $i \rightarrow f$. Здесь мы выходим за рамки первого порядка теории возмущений и должны принимать во внимание *нелинейные* (многофотонные) процессы. Они формально появляются в высших порядках по отношению к полю \mathbf{A} , а соответствующие амплитуды содержат больше операторов рождения и уничтожения, см.

раздел 2.2. В частности, возможна много-фотонная ионизация атома, когда энергия одного фотона ниже порога ионизации.

5.2 Фотопоглощение

Теперь мы рассмотрим квантовую механику излучения и поглощения света более детально. Элементарный акт поглощения фотона ($\lambda\mathbf{k}$) квантовой системой испытывающей переход $i \rightarrow f$ описывается золотым правилом (26.6) с матричным элементом (4.112),

$$\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2\pi\hbar}{\omega V} n_{\lambda\mathbf{k}} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} (\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \right| i \right\rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (5.15)$$

В каждом акте энергия системы возрастает на $\hbar\omega = E_f - E_i$ и средняя скорость поглощения энергии находится из

$$\hbar\omega \dot{w}_{fi} = \frac{4\pi^2 \bar{n}_{\lambda\mathbf{k}}}{V} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} (\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} \right| i \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}), \quad (5.16)$$

где мы использовали правило (I.3.26) переходя к δ -функции от частот и ввели среднюю заселённость фотонов $\bar{n}_{\lambda\mathbf{k}}$.

Поток энергии фотонов падающий на атом в секунду равен

$$(\text{density}) \times (\text{velocity}) \times (\text{energy}) = \frac{\bar{n}_{\lambda\mathbf{k}}}{V} c \hbar\omega. \quad (5.17)$$

Отношение поглощённой энергии к падающему потоку даёт *сечение поглощения*, сравните с сечением рассеяния, раздел 3.1, для данной частоты ω и конкретного перехода $i \rightarrow f$ в системе,

$$\sigma_{fi}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\hbar c \omega} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} (\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}), \quad (5.18)$$

или, для системы частиц с тем же отношением e/m ,

$$\sigma_{fi}(\omega) = \frac{4\pi^2 \alpha}{m^2 \omega} \left| \left\langle f \left| \sum_a e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} (\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}), \quad (5.19)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$. Для частиц со спином нужно таким же образом включить взаимодействие (4.115) с магнитным полем волны.

Эти результаты отвечают бесконечно узкой *линии поглощения*. Но мы знаем, что в действительности возбуждённое состояние $|f\rangle$ только *квазистационарно*, см. раздел I.9.12; оно имеет конечное время жизни и, следовательно, неопределённость энергии — конечную *ширину* Γ . Если падающая волна имеет энергетический разброс $\Delta E > \Gamma$, она может возбудить все монохроматические компоненты состояния $|f\rangle$ с сохранением энергии внутри неопределённости. В стандартном приближении экспоненциального распада, см. раздел I.5.8, мы должны заменить $\delta(\omega - \omega_{fi})$ на резонансную кривую Лорентца,

$$\delta(\omega - \omega_{fi}) \Rightarrow \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_{fi})^2 + \gamma^2/4}, \quad \gamma = \frac{\Gamma_f + \Gamma_i}{\hbar}. \quad (5.20)$$

Здесь мы учли также возможную конечную ширину Γ_i начального состояния. При $\gamma \rightarrow 0$, мы приходим обратно к $\delta(\omega - \omega_{fi})$. Таким образом, мы имеем *естественную форму* линии поглощения,

$$\sigma_{fi}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\hbar c \omega} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} (\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2 \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_{fi})^2 + \gamma^2/4}. \quad (5.21)$$

Если, как это часто случается, матричный элемент в (5.21) есть плавная функция частоты ω , т.е. приближённо константа внутри ширины линии γ , мы можем найти *интегральное сечение*,

$$\int d\omega \sigma_{fi}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\hbar c \omega_{fi}} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} (\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2. \quad (5.22)$$

5.3 Длинноволновый предел

Для нерелятивистской системы частиц в связанном состоянии, разность фаз для разных частиц в экспоненте матричного элемента, как правило, небольшие. Это следует из простой цепи приближённых оценок, где R есть размер системы:

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a) \sim kR = \frac{\omega}{c} R \sim \frac{ER}{\hbar c} \sim \frac{p^2}{m\hbar c} \frac{\hbar}{p} \sim \frac{v}{c}. \quad (5.23)$$

Поэтому для нерелятивистских систем, $kR \ll 1$, размер, как правило, мал по сравнению с длиной волны излучения. В атомах, за исключением самых

тяжелых те, $kR \sim v/c \sim Z\alpha \ll 1$. Неравенство $kR \ll 1$ также справедливо для большинства возбужденных ядерных уровней.

Пользуясь тем, что $\exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)) \approx 1$, мы упрощаем интегральное сечение (5.22) до

$$\int d\omega \sigma_{fi}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\hbar c \omega_{fi}} \left| \left\langle f \left| \left(\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} \cdot \sum_a \frac{e_a}{m_a} \hat{\mathbf{p}}_a \right) \right| i \right\rangle \right|^2. \quad (5.24)$$

В этом приближении вклады всех частиц *когерентны*, они излучают и поглощают свет как целое. Если силы внутри системы зависят только от координат частиц, $\hat{\mathbf{r}}_a$ не коммутируют только с оператором кинетической энергии, и уравнение движения (I.7.89) устанавливает связь между недиагональными матричными элементами,

$$(\hat{\mathbf{p}}_a)_{fi} = i m_a \omega_{fi} (\hat{\mathbf{r}}_a)_{fi}. \quad (5.25)$$

Тогда сечение (5.24) определяется матричным элементом электрического *дипольного момента* (I.21.63),

$$\int d\omega \sigma_{fi} = \frac{4\pi^2}{\hbar c \omega_{fi}} \left| \left\langle f \left| \mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} \cdot \sum_a \omega_{fi} e_a \mathbf{r}_a \right| i \right\rangle \right|^2 = \frac{4\pi^2 \omega_{fi}}{\hbar c} |(\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}_{fi})|^2. \quad (5.26)$$

Задача 5.1

Показать, что результат (5.26) может быть получен из гамильтониана

$$H'_{\text{dip}} = -(\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathcal{E}}) \quad (5.27)$$

для взаимодействия дипольного момента системы с электрическим полем волны (28.30), которое подразумевается однородным на размересистемы.

Задача 5.2

Вычислить интегральное сечение поглощения света линейным гармоническим осциллятором (заряда e) в n -том стационарном состоянии, если волна линейно поляризована под углом θ по отношению к оси колебаний.

Решение

$$\int d\omega \sigma_{n,n+1} = 2\pi^2 \frac{e^2}{mc} \cos^2 \theta (n+1). \quad (5.28)$$

Для $n = 0$ мы получаем классический результат [11].

Переходы генерируемые электрическим диполем классифицируются как E1 переходы в терминологии раздела II.6.6. Интенсивность дипольного перехода часто выражается в терминах *сил осцилляторов*, определяемых для каждого перехода как

$$F_{fi} = \frac{2m(E_f - E_i)}{\hbar^2} \left| \sum_a (x_a)_{fi} \right|^2, \quad (5.29)$$

где предполагается, что все частицы, обычно электроны в атоме или в молекуле, имеют одинаковый заряд. Для системы, находящейся первоначально в основном состоянии, все силы осцилляторов положительны. Согласно правилу сумм ТРК (I.7.138), в отсутствие зависящих от скорости сил,

$$\sum_f F_{fi} = Z, \quad (5.30)$$

числу электронов в атоме. Отсюда мы находим полное интегральное сечение поглощения (сумма по всем возможным переходам $0 \rightarrow f$)

$$\int d\omega \sigma = \sum_f \int d\omega \sigma_{f0} = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} Z. \quad (5.31)$$

Этот результат совпадает с классическим пределом [11] будучи независимым от типа потенциальных взаимодействий внутри системы.

Выражение (5.31) справедливо также для нейтральных атомов, если мы ограничим сверху частоты света, чтобы избежать ядерных возбуждений и рождения новых частиц. Если система не является электрически нейтральной, она будет двигаться в поле волны, как целое, что соответствует классическому *томсоновскому рассеянию* [11], §78. Если мы интересуемся только внутренними возбуждениями, мы должны отделить движение центра масс. Это было сделано в *Задаче I.7.10* для атомного ядра, где в результате появились эффективные заряды (I.7.141) для протонов и нейтронов.

Задача 5.3

Полагая справедливым правило сумм ТРК, найти полное интегральное сечение дипольного фотопоглощения ядра с Z протонами и N нейтронами; разностью масс протона и нейтрона пренебречь, $m_p \approx m_n \equiv m$.

Решение Используя эффективные заряды (I.7.141), мы находим часть ядерного сечения поглощения обязанную внутренним возбуждениям,

$$\int dE_\gamma \sigma_{\text{exc}} = \frac{2\pi^2 \hbar}{mc} \left((e_p^{\text{eff}})^2 Z + (e_n^{\text{eff}})^2 N \right) = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar}{mc} \frac{NZ}{A} = 0.06 \frac{NZ}{A} \text{ MeV} \cdot \text{barn},$$

$$(5.32)$$

где $1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$ — единица площади принятая в ядерной физике. Таким образом, эффективная сила осциллятора для дипольных ядерных переходов равна NZ/A . Движение ядра как целого (массы $m(Z+N) \equiv mA$) определяется вкладом центра масс, $eZ\mathbf{R}$, в дипольный момент, который давал бы силу осциллятора $(Z/A)^2 \cdot A = Z^2/A$. С этой добавкой, полная сила осциллятора восстанавливается в согласии с (5.30),

$$\frac{NZ}{A} + \frac{Z^2}{A} = Z. \quad (5.33)$$

В действительности, нельзя считать реалистические ядерные взаимодействия не зависящими от скорости, как это предполагается в правиле сумм ТРК.

Задача 5.4

Предположим, что в дополнении к обычным силам зависящим от координат имеются *обменные силы* типа

$$\hat{U}_{\text{exch}} = -U(|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n|)\hat{\mathcal{P}}_{np}, \quad (5.34)$$

где $\hat{\mathcal{P}}_{np}$ — оператор превращающий протон в нейтрон и наоборот без изменения пространственных и спиновых характеристик частиц, рис. 5.2. Показать, что этот вклад увеличивает (для сил отталкивания $U(r_{np}) > 0$) правило сумм (5.30), которое для сферически симметричного состояния $|i\rangle$ становится

$$\sum_f F_{fi} = Z \left\{ 1 + \frac{m}{3\hbar^2} \left\langle i \left| \sum r_{np}^2 U(r_{np}) \hat{\mathcal{P}}_{np} \right| i \right\rangle \right\}. \quad (5.35)$$

Здесь сумма идёт по всем нейтрон-протонным *парам*.

5.4 Высшие мультипольные переходы

Несмотря на то, что *дипольное приближение* предыдущего раздела справедливо в длинноволновом пределе, $\lambda \gg R$, для полного сечения фотопоглощения нерелятивистской системой, может оказаться, что для данного перехода $i \rightarrow f$ дипольный матричный элемент \mathbf{d}_{fi} мал или равен нулю из-за правил отбора по угловому моменту и чётности, см. раздел II.7.5. Дипольный оператор не может вызвать переход между состояниями одинаковой чётности или с изменением углового момента $\Delta J > 1$. В этих случаях

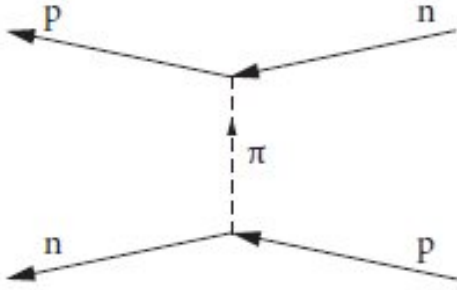


Рис. 5.2. Пионный механизм возможного обменного взаимодействия.

необходимо рассмотреть следующие члены разложения $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)]$ в (5.22) по степеням kR .

Линейные по kR члены в матричном элементе могут быть переписаны как

$$i \frac{e}{m} (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \frac{ie}{2m} (M_+ + M_-), \quad (5.36)$$

где

$$M_{\pm} = (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \pm (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}). \quad (5.37)$$

Используя уравнение движения (I.7.89), Мы получаем

$$M_+ = m(\mathbf{e} \cdot \dot{\mathbf{r}})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r})m(\mathbf{k} \cdot \dot{\mathbf{r}}) = m \frac{d}{dt} \left((\mathbf{e} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right). \quad (5.38)$$

Так как $(\mathbf{e} \cdot \mathbf{k}) = 0$,

$$M_+ = me_i k_j \frac{d}{dt} (x_i x_j) = me_i k_j \frac{d}{dt} \left(x_i x_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} r^2 \right) = \frac{m}{3e} e_i k_j \dot{Q}_{ij}, \quad (5.39)$$

где Q_{ij} — тензор электрического квадрупольного момента (II.1.130) данной частицы; суммируя по всем частицам мы получаем полный квадрупольный момент системы. С использованием гейзенберговских уравнений движения для \hat{Q}_{ij} , соответствующий матричный элемент может быть представлен в виде

$$\frac{ie}{2m} (M_+)_{fi} = \frac{i}{6} e_i k_j (\dot{Q}_{ij})_{fi} = \frac{1}{6\hbar} e_i k_j ([\hat{Q}_{ij}, H^o])_{fi} = -\frac{1}{6} \omega_{fi} e_i k_j (Q_{ij})_{fi}. \quad (5.40)$$

Этот член ответственен за *квадрупольные* переходы.

Задача 5.5

Показать, что этот результат может быть выведен из взаимодействия \hat{H}'_Q (II.9.32) квадрупольного момента системы с градиентами электрического поля волны.

M_- в уравнении (5.36) равен

$$M_- = ([\mathbf{k} \times \mathbf{e}] \cdot [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]) = \hbar ([\mathbf{k} \times \mathbf{e}] \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}). \quad (5.41)$$

Вектор $[\mathbf{k} \times \mathbf{e}]$, согласно (4.31), определяет направление \mathbf{b} магнитного поля падающей волны. Таким образом, M_- отвечает за взаимодействие орбитального магнитного момента с магнитным полем,

$$\frac{ie}{2m} M_- = \frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \mathbf{b}) \omega = \hbar g^\ell (\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \mathbf{b}) \omega. \quad (5.42)$$

Задача 5.6

Показать, что вместе со спиновым членом H'_{spin} , (4.110), результат (5.42) может быть выведен из взаимодействия

$$H'_{\text{magn}} = -(\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \hat{\mathbf{B}}), \quad \hat{\boldsymbol{\mu}} = \hbar(g^s \hat{\mathbf{s}} + g^\ell \hat{\boldsymbol{\ell}}), \quad (5.43)$$

полного магнитного момента частицы с магнитным полем волны (4.31) в предположении однородности поля на размере атома.

Мы получили в одном приближении по отношению к параметру $(kR) \sim v/c$, *квадрупольные* (E2) и *магнитно дипольные* (M1) переходы. Эти переходы имеют вероятности в среднем на фактор $(kR)^2 \sim (v/c)^2$ меньше, чем дипольные (E1) переходы. В общем случае, высшие мультипольные (EL) переходы и магнитные (ML – 1) переходы имеют одинаковый порядок величины,

$$w(\text{EL}) \sim w(\text{ML} - 1) \propto (kR)^{2(L-1)} w(\text{E1}). \quad (5.44)$$

Магнитные мультиполи, по природе магнитного взаимодействия, содержат дополнительную степень $v/c \sim kR$ по сравнению с электрическими мультиполями. В ядрах, специфические особенности структуры ведут к большому усилению E2 переходов. Мы не будем здесь углубляться в детали мультипольного разложения, которое требует разложения фотонного поля по сферическим волнам [10].

5.5 Индуцированное и спонтанное излучение

Матричный элемент излучения фотона отвечает уменьшению энергии атома на $\omega = \omega_{fi}$ и увеличению фотонных чисел заполнения, $n_{\lambda\mathbf{k}} \rightarrow n_{\lambda\mathbf{k}} + 1$. Соответствующий матричный элемент оператора рождения фотона, $\sqrt{n_{\lambda\mathbf{k}} + 1}$, порождает индуцированное ($\propto n_{\lambda\mathbf{k}}$) и спонтанное (не зависящее от числа имеющихся до акта излучения фотонов) излучения.

Золотое правило определяет дифференциальную вероятность излучения в единицу времени, которая должна содержать умножение на плотность состояний $d\rho_f$ излучённого фотона (3.92) в элемент телесного угла do ,

$$\begin{aligned} d\dot{\omega}_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar^2 c^2} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} (\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2 \frac{2\pi\hbar^2}{\omega V} (n_{\lambda\mathbf{k}} + 1) d\rho_f \\ &= \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} (\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2 (n_{\lambda\mathbf{k}} + 1) do. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Как и должно быть, нормировочный объём V исчез из ответа. *Интенсивность* излучения (энергия в данной моде ($\lambda\mathbf{k}$) излучённая в единицу времени в угол do) даётся выражением

$$dI_{\lambda\mathbf{k}} = \hbar\omega d\dot{\omega}_{fi} = \frac{\omega^2}{2\pi c^3} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)} (\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2 (n_{\lambda\mathbf{k}} + 1) do. \quad (5.46)$$

Если состояние поля не имеет определённого числа фотонов, то $n_{\lambda\mathbf{k}}$ должно быть заменено на среднее значение $\bar{n}_{\lambda\mathbf{k}}$, как, например, в случае теплового равновесия (5.10).

Задача 5.7

Мы знаем (см. *Задачу 4.5*), что фотон не может находиться в состоянии с полным угловым моментом $J = 0$. Поэтому, сохранение углового момента запрещает излучение одиночного фотона из $J_i = J_f = 0$. Показать, что это следует также из вида матричного элемента в (5.46).

Решение При выборе \mathbf{k} вдоль оси квантования, показатель экспоненты $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$ не зависит от азимутального угла и поэтому не изменяет проекцию M_i равную нулю для $J_i = 0$. Но оператор $(\mathbf{e}^* \cdot \hat{\mathbf{p}})$ содержит только поперечные компоненты импульса, $\hat{p}_{x,y}$, которые меняют $|M|$ на 1 и ведут к $M_f = \pm 1$, которые невозможны для $J_f = 0$.

Весь оператор в (5.46) не действует на спиновые переменные, поэтому аргументы *Задачи 5.7* могут быть использованы для $L_i = 0 \rightarrow L_f = 0$ перехода, который также оказывается запрещён для любых значений S_i, S_f, J_i, J_f . Такие переходы, однако, могут быть индуцированы спиновым магнитным взаимодействием H'_s , в то время как одно-фотонные $J_i = 0 \rightarrow J_f = 0$ переходы запрещены абсолютно. Вместо этого, возможно излучение двух фотонов во втором порядке теории возмущений или благодаря квадратичному члену $\sim \mathbf{A}^2$. В ядрах возможен альтернативный процесс *внутренней конверсии*, когда излучаемая энергия передаётся атомному электрону или тратится на рождение электрон-позитронной пары.

Легко видеть, что коэффициенты Эйнштейна удовлетворяют соотношениям установленным в разделе 5.1. Если монохроматическая электромагнитная волна частоты ω распространяется в среде, в которой атомы могут испытывать резонансный переход с той же частотой, то элементарные акты поглощения и излучения будут происходить с вероятностями установленными выше. Решающим отличием индуцированного и спонтанного излучения является то, что акты индуцированного излучения увеличивают интенсивность волны, поскольку испускаемые фотоны имеют те же квантовые числа ($\omega \lambda \mathbf{k}$). При спонтанном излучении, фотоны излучаются некогерентно по всем направлениям \mathbf{k} . В общем случае, направление \mathbf{k} не совпадает с направлением падающей волны. Для волны с $\bar{n}_{\lambda \mathbf{k}} \gg 1$, спонтанное излучение не влияет на интенсивность.

5.6 Дипольное излучение

Рассмотрим сначала спонтанное излучение. В *дипольном приближении*, $kR \ll 1$,

$$dI_{\lambda \mathbf{k}} = \frac{\omega^2}{2\pi c^3} \left| \left\langle f \left| \sum_a \frac{e_a}{m_a} (\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) \right| i \right\rangle \right|^2 do. \quad (5.47)$$

Для системы с потенциальным взаимодействием, используя опять (5.25), находим

$$dI_{\lambda \mathbf{k}} = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} |(\mathbf{e}_{\lambda \mathbf{k}}^* \cdot \mathbf{d}_{fi})|^2 do. \quad (5.48)$$

Этот результат для интенсивности дипольного излучения очень похож на классическую формулу [11], § 67. Для того, чтобы проинтегрировать по углом и просуммировать по поляризациям излучённого фотона, выберем

действительные векторы поляризации $\mathbf{e}_{1\mathbf{k}}$ и $\mathbf{e}_{2\mathbf{k}}$ в поперечной плоскости так, чтобы один из этих векторов был перпендикулярен к вектору \mathbf{d}_{fi} , например $(\mathbf{e}_{2\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}_{fi}) = 0$. Если угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{d}_{fi} равен θ , переходный вектор \mathbf{d}_{fi} имеет компоненты вдоль \mathbf{k} ($\propto \cos \theta$) и вдоль $\mathbf{e}_{1\mathbf{k}}$ ($\propto \sin \theta$). Тогда

$$|(\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}^* \cdot \mathbf{d}_{fi})|^2 = |\mathbf{d}_{fi}|^2 \sin^2 \theta. \quad (5.49)$$

Угловая зависимость излучения, $\propto \sin^2 \theta$, по отношению к волновому вектору \mathbf{k} такая же, как в классической электродинамике. Полная интенсивность во все направления даётся

$$I_\omega = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 \int d\Omega \sin^2 \theta = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (5.50)$$

Мы получили классическую формулу

$$I_\omega = \frac{2\omega^4}{3c^3} \overline{|\mathbf{d}(t)|^2} \quad (5.51)$$

для излучения осциллятора со средним квадратом дипольного момента $\overline{|\mathbf{d}(t)|^2}$. Так это и должно быть согласно *принципу соответствия* между классической и квантовой теориями. Классический осциллятор может быть представлен разложением в ряд Фурье,

$$\mathbf{d}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{d}_n e^{-in\omega t}, \quad \mathbf{d}_{-n} = \mathbf{d}_n^*, \quad (5.52)$$

где последнее равенство следует из того факта, что $\mathbf{d}(t)$ есть действительная функция. Поэтому, зависящие от времени компоненты дают

$$\mathbf{d}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \{\mathbf{d}_n e^{-in\omega t} + \mathbf{d}_n^* e^{in\omega t}\} = \sum_{n=1}^{\infty} \{2 \cos(n\omega t) \cdot \text{Re } \mathbf{d}_n - 2 \sin(n\omega t) \cdot \text{Im } \mathbf{d}_n\}. \quad (5.53)$$

При усреднении по времени, $\overline{\cos(n\omega t) \cos(n'\omega t)} = (1/2)\delta_{nn'}$ и т.д., мы получаем

$$\begin{aligned} \overline{|\mathbf{d}(t)|^2} &= 4 \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (\text{Re } \mathbf{d}_n)^2 \overline{\cos^2(n\omega t)} + (\text{Im } \mathbf{d}_n)^2 \overline{\sin^2(n\omega t)} \right\} \\ &= 2 \sum_{n=1}^{\infty} \{ (\text{Re } \mathbf{d}_n)^2 + (\text{Im } \mathbf{d}_n)^2 \} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} |\mathbf{d}_n|^2. \end{aligned} \quad (5.54)$$

В классическом пределе матричные элементы \mathbf{d}_{fi} переходят в фурье-компоненты (I.15.80) \mathbf{d}_n классической функции $\mathbf{d}(t)$, и мы приходим к результату (5.50) — только одна гармоника из суммы (5.54) даёт вклад в данный переход.

Величина обратная вероятности перехода в единицу времени определяет время жизни возбуждённого состояния по отношению к спонтанному дипольному переходу. $i \rightarrow f$,

$$\tau_{fi} = (\dot{w}_{fi})^{-1} = \frac{1}{I_{\omega}/(\hbar\omega)} = \frac{3\hbar c^3}{4\omega^3} |\mathbf{d}_{fi}|^{-2}. \quad (5.55)$$

Для оптических переходов в атомах, $kR \sim \omega R/c \sim \alpha$, и с оценкой матричных элементов $|\mathbf{d}|^2 \sim e^2 R^2$, мы получаем

$$\dot{w} \sim \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}|^2 \sim \alpha (kR)^2 \omega \sim \alpha^3 \omega, \quad \tau \sim \frac{1}{\omega \alpha^3}. \quad (5.56)$$

Используя $\omega \sim 10^{15} \text{ с}^{-1}$, мы находим $\dot{w} \sim 10^{(9 \div 8)} \text{ сек}^{-1}$ и $\tau \sim 10^{-(8 \div 9)} \text{ сек}$. Для низколежащих ядерных возбуждений $E \sim 1 \text{ МэВ}$, $\omega \sim 10^{21} \text{ сек}^{-1}$, $\dot{w} \sim 10^{15} \text{ сек}^{-1}$, $\tau \sim 10^{-15} \text{ сек}$.

Задача 5.8

Вычислить интенсивность спонтанного электрического квадрупольного (E2) и магнитно-дипольного (M1) излучения и сравнить с классическими результатами [11], § 71.

5.7 Правила отбора и примеры

Оптические спектры атомов создаются переходами внешних электронов. Для них $kR \sim \alpha \ll 1$, и наиболее вероятны дипольные переходы с изменением чётности (*правило Лапорта*). В лёгких атомах спин-орбитальная связь слаба и спектра можно классифицировать по LS -связи, раздел II.8.4, когда L и S являются хорошими квантовыми числами стационарных состояний. Дипольный оператор, как и любой электрический мультиполь, не действует на спиновые переменные, что даёт правило отбора $\Delta S = 0$. Мы можем теперь сформулировать *правила отбора* для EL переходов, которые справедливы, если возможно пренебречь спин-орбитальной связью,

$$\Pi_i \Pi_f = (-)^L, \quad \Delta S = 0, \quad |J_i - J_f| \leq L \leq J_i + J_f, \quad |L_i - L_f| \leq L \leq L_i + L_f. \quad (5.57)$$

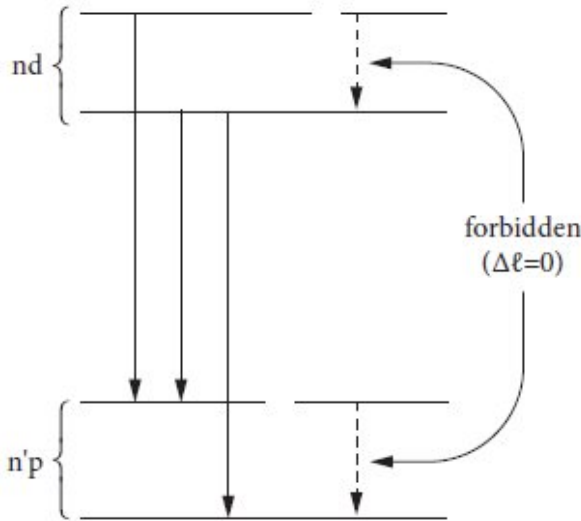


Рис. 5.3. Разрешённые и запрещённые дипольные переходы $nd \rightarrow n'p$.

Существование тонкой структуры проявляется в расщеплении спектральных линий. В водородоподобных атомах, в пренебрежении сверхтонкой структурой, полный угловой момент обеспечивается электронами $\mathbf{J} = \mathbf{j} = \boldsymbol{\ell} + \mathbf{s}$. Поэтому, для дипольных ("разрешённых") переходов, $\Delta j = 0, \pm 1$ и $\Delta\ell = \pm 1$; здесь чётность $\Pi = (-)^{\ell}$ изменяется, $\Pi_i \Pi_f = -1$, и переходы с $\Delta\ell = 0$ невозможны. Рис. 5.3 показывает разрешённые переходы $nd \rightarrow n'p$. Для серии Лаймана, $n \rightarrow n' = 1$, разрешены два перехода, $np_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$, и $np_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$. Поэтому, все линии серии Лаймана *дублеты*. Расстояние между компонентами дублета определяется расщеплением верхнего, np , уровня, которое быстро падает с ростом n , см. раздел II.8.3. Наибольшее расстояние имеет место для $n = 2$ (лаймановская- α линия в ультрафиолете).

Для серии Бальмера, $n \rightarrow n' = 2$, конечными состояниями могут быть $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$. Разрешены семь дипольных переходов: $ns_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2,3/2}$; $np_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$; $np_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$; $nd_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2,3/2}$; $nd_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$. На практике, наиболее важной является так называемая H_{α} линия, $n = 3 \rightarrow n' = 2$; Игнорируя лэмбовский сдвиг мы имеем пять *различных* спектральных линий, рис. 5.4. Расщепление между верхними уровнями мало и мы получаем две группы близких линий на расстоянии $E(2p_{3/2}) - E(2p_{1/2}) \approx 0.36 \text{ с}^{-1}$. Этот бальмеровский дублет с почти одинаковым расщеплением для всех начальных n был открыт Майкельсоном, 1887.

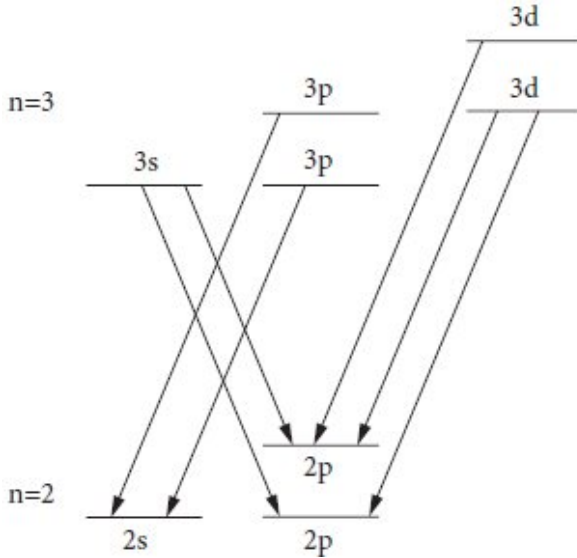


Рис. 5.4. Разрешённые дипольные переходы для $n = 3 \rightarrow n' = 2$.

Тонкая структура спектров сложных атомов генерирует мультиплеты спектральных линий $n_i L_i S_i J_i \rightarrow n_f L_f S_f J_f$. Более детальный анализ, основанный на величинах ККГ показывает, что наиболее интенсивными являются главные линии с $\Delta J = \Delta L$; остальные линии называются *спутниками*. Из-за сверхтонкой структуры, см. раздел II.8.6, единственным *точным* правилом отбора остаётся правило отбора по полному моменту атома $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$,

$$|F_i - F_f| \leq L \leq F_i + F_f. \quad (5.58)$$

Тем не менее, в силу слабости сверхтонкого взаимодействия, чисто электронные правила отбора выполняются с высокой точностью. Дипольные переходы между уровнями тонкой или сверхтонкой структуры одного электронного терма запрещены, так как все эти уровни имеют одинаковую чётность.

Для атомных переходов между далеко раздвинутыми уровнями (разность энергий ΔE порядка энергии связи E_b), вероятности E2 и M1 переходов оказываются одного порядка величины. Для меньших частот, $\Delta E \ll E_b$, параметр kR уменьшается, в то время как v/c остаётся того же порядка; тогда M1 переходы становятся более вероятными, чем E2, например, между компонентами тонкой структуры данного электронного терма. С

оператором магнитного момента атомных электронов,

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_B(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) = \mu_B(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}), \quad (5.59)$$

M1 переходы индуцируются оператором $\hat{\mathbf{S}}$, поскольку $\hat{\mathbf{J}}$ сохраняется, когда не учитывается сверхтонкое взаимодействие. В LS -схеме, состояния характеризуются квантовыми числами n, L и S , которые неменяются под действием оператора S . Только J может измениться, и мы получаем правило отбора для M1 переходов:

$$n_f = n_i, \quad \Delta S = \Delta L = \Delta \Pi = 0, \quad J_f = J_i, J_i \pm 1. \quad (5.60)$$

M1 переходы возможны также между компонентами тонкой структуры данного терма, в то время как E2 переходы здесь практически невероятны из-за очень низкой частоты, см. (5.42). Здесь излучение идёт в микроволновом диапазоне.

Задача 5.9

В результате лэмбовского сдвига, см. раздел 4.8, электронный $2s$ уровень в атоме водорода лежит выше, чем $2p_{1/2}$ уровень. Оценить вероятность $2s \rightarrow 2p_{1/2}$ перехода.

Решение Из-за малой выделяемой энергии вероятность спонтанного $2s \rightarrow 2p_{1/2}$ дипольного излучения очень мала; она соответствует времени жизни приблизительно 20 лет.

Время жизни метастабильного $2s_{1/2}$ состояния в атоме водорода действительно аномально велико [18]. Переход $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ в основное состояние не может быть E1, E2, или M1 типа. E1 переход запрещён по чётности; E2 невозможен, потому что $\ell_i = \ell_f = 0$. M1 переход запрещён в нерелятивистском приближении, потому что M1 оператор (5.43) не может менять радиальную функцию $2s \rightarrow 1s$; Этот переход становится разрешённым благодаря малым релятивистским компонентам волновых функций, см. раздел 13. Но такие примеси действительно очень малы для водорода и соответствующее время жизни было бы около двух дней. В действительности, время жизни $2s_{1/2}$ уровня $\sim (1/7)$ сек. определяется двухфотонным излучением.

В присутствии слабого магнитного поля, появляются E1 переходы между зеемановскими компонентами различных термов с $\Delta M = 0, \pm 1$ и противоположной чётностью, см. (II.9.44). Зеемановские подуровни одного терма имеют одинаковую чётность и могут быть связаны M1 переходами между

соседними компонентами с $\Delta M = \pm 1$. Эти переходы, используемые в *электронном парамагнитном резонансе* принадлежат обычно сантиметровому диапазону. Строго говоря, полный момент \mathbf{J} , в противоположность его проекции M на направление поля, не сохраняется в магнитном поле. В высоких порядках возникают примеси с $J' \neq J$, и некоторые ранее запрещённые переходы становятся разрешёнными, хотя в слабом поле их вероятности ещё малы.

В молекулах, из-за адиабатичности медленного движения тяжелых ионов, см. раздел 1.5; оператор дипольного момента электронов может быть определен при фиксированных значениях \mathbf{R} ионных координат, $\mathbf{d} \rightarrow \mathbf{d}(\mathbf{R})$. Если ионы находятся в возбуждённом вибрационном состоянии вблизи точки равновесия \mathbf{R}_0 , мы приближённо имеем

$$\mathbf{d}(\mathbf{R}) \approx \mathbf{d}(\mathbf{R}_0) + \left((\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \cdot \nabla \right) \mathbf{d}. \quad (5.61)$$

Второе слагаемое в (5.61) является *векторным* оператором по отношению к ионным переменным. Молекулярные колебания вокруг равновесной точки описываются стандартными функциями осциллятора. Оператор линейный по смещениям ядер приводит к переходам между соседними колебательными состояниями с изменением числа колебательных квантов на ± 1 . *Ангармонические эффекты* могут нарушать это правило отбора.

5.8 Фотоэффект

Фотопоглощение света системой испытывающей переходы в *дискретном* спектре показывает резонансный характер. Для переходов в *непрерывный* спектр, как правило, сечение есть гладкая функция от частоты света. Выбивание электрона из атома в континуум становится возможным, когда частота падающего света превышает *порог ионизации*. Мы помним, что объяснение Эйнштейном этого закона фотоэффекта, см. раздел I.1.3, было одним из важных указаний на квантовую природу света.

Когда фотон взаимодействует со *свободным* электроном, поглощение не происходит, так как законы сохранения энергии и импульса не могут быть одновременно выполнены. Поглощение возможно только для *связанного* электрона, когда избыток импульса может быть принят ядром или кристаллической решеткой. Отсюда, качественно понятно, что вероятность фотопоглощения увеличивается для сильно связанных электронов (конечно, только если $\hbar\omega$ превышает энергию ионизации). Экспериментальное сечение фотоэффекта, рис. 5.5, резко возрастает когда энергия достигает

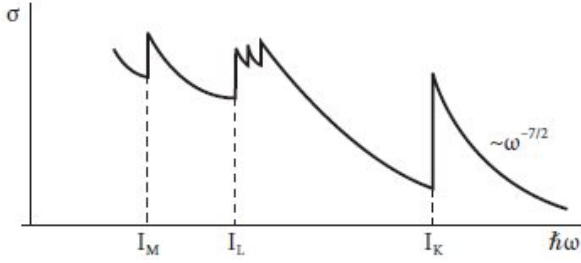


Рис. 5.5. Сечение атомного фотоэффекта как функция частоты света.

порога ионизации следующей атомной оболочки (M, L, K), но уменьшается с дальнейшим ростом частоты, так как относительная степень связанности электрона уменьшается. Небольшие пики на схеме возникают из тонкой структуры атомных спектров. Энергия ионизации I_K основного состояния атома определяет границу после которой сечение монотонно уменьшается, $\propto Z^5 \omega^{-7/2}$ в нерелятивистской области $\hbar\omega \ll mc^2$. Сильная зависимость от заряда ядра, $\propto Z^5$, которая существует и дальше в релятивистской области, это просто следствие усиления связанности.

Расчеты сечения фотоэффекта достаточно просты для диапазона частот

$$E_b \ll \hbar\omega \ll mc^2. \quad (5.62)$$

Здесь электрон в континууме всё ещё может рассматриваться как нерелятивистский, $p \ll mc$, в то время как его скорость велика по сравнению с типичными атомными скоростями v_{at} на внутренних оболочках, поскольку

$$\frac{mv^2}{2} \approx \hbar\omega \gg E_b \sim \frac{Z^2 e^2}{2a} = \frac{Z^2 e^2}{2\hbar^2/(me^2)}, \quad (5.63)$$

что означает малость параметра Зоммерфельда (I.2.66),

$$\eta \equiv \frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1. \quad (5.64)$$

В этих условиях импульс фотона много меньше импульса фотоэлектрона,

$$\frac{\hbar k}{p} = \frac{\hbar\omega}{cp} \approx \frac{p^2}{2mcp} = \frac{v}{2c} \ll 1. \quad (5.65)$$

При выполнении условия $v \gg v_{\text{at}}$, искажение состояния выбитого электрона атомным полем невелико и мы можем использовать теорию возмущений,

полагая волновую функцию конечного электрона плоской волной с импульсом \mathbf{p} . Общее выражение (5.19) для сечения фотопоглощения нужно проинтегрировать по энергии электрона с помощью δ -функции и умножить на плотность конечных состояний

$$d\rho_f = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} m p d\omega \quad (5.66)$$

электрона летящего в телесный угол $d\omega$,

$$d\sigma(\omega) = \frac{4\pi^2\alpha\hbar}{m^2\omega} |\langle f | e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} (\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) | i \rangle|^2 d\rho_f. \quad (5.67)$$

Здесь $(\omega\lambda\mathbf{k})$ являются характеристиками падающего фотона, и мы предполагаем, для простоты, чисто одночастичный переход (забывая о других электронах в атоме). Упорядочение экспоненты и оператора импульса в матричном элементе является произвольным, поскольку они содержат коммутирующие компоненты.

Будем проводить расчет для начального состояния электрона в K -оболочке, где его волновая функция водородоподобна (II.3.20),

$$\langle \mathbf{r} | i \rangle = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}} e^{-Zr/a}, \quad \langle \mathbf{r} | f \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{(i/\hbar)(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})}. \quad (5.68)$$

Матричный элемент,

$$M_{fi} = \langle f | e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} (\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) | i \rangle = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}} \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} \cdot \int d^3r e^{-(i/\hbar)(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} (-i\hbar\nabla) e^{-Zr/a}, \quad (5.69)$$

может быть легко вычислен с помощью интегрирования по частям. Так как $(\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k}) = 0$, мы получаем импульс \mathbf{p} конечного электрона,

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V}} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}) \int d^3r e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) - Zr/a}, \quad (5.70)$$

где определён передаваемый ядру импульс,

$$\hbar\mathbf{q} = \hbar\mathbf{k} - \mathbf{p}. \quad (5.71)$$

Окончательное интегрирование даёт матричный элемент,

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{64\pi Z^5}{a^5 V}} \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}})}{[(Z/a)^2 + q^2]^2}, \quad (5.72)$$

и дифференциальное сечение,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32\alpha}{m\omega\hbar^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^5 \frac{p(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}})^2}{[(Z/a)^2 + q^2]^4}. \quad (5.73)$$

Результат (5.73) может быть упрощён с помощью условий ограничивающих область применимости нашего подхода. Выберем ось квантования вдоль импульса фотона \mathbf{k} и ось- x вдоль вектора поляризации $\mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}$. Тогда $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\lambda\mathbf{k}}) = p \sin \theta \cos \varphi$, и

$$\hbar^2 q^2 = p^2 \left(1 - 2 \frac{\hbar k}{p} \cos \theta + \hbar^2 k^2\right) \approx p^2 \left(1 - 2 \frac{\hbar k}{p} \cos \theta\right) \approx p^2 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right). \quad (5.74)$$

Также,

$$\frac{p}{\hbar} \frac{a}{Z} = \frac{mv}{\hbar} \frac{\hbar^2}{mZe^2} = \frac{\hbar v}{Ze^2} = \frac{1}{\eta} \gg 1. \quad (5.75)$$

Таким образом, в наших приближениях,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32\alpha}{m\omega\hbar^2} \left(\frac{Z}{a}\right)^5 \frac{p^3 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{(p/\hbar)^8 [1 - (v/c) \cos \theta]^4} = \frac{32\alpha\hbar}{m\omega} \eta^5 \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{[1 - (v/c) \cos \theta]^4}. \quad (5.76)$$

Как отмечалось в начале этого раздела, главная зависимость от энергии

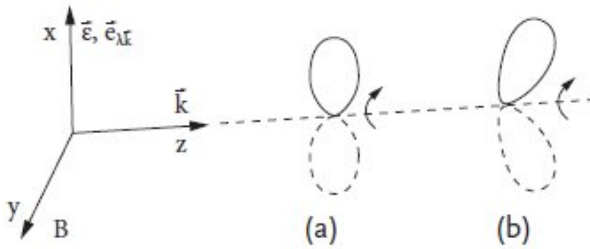


Рис. 5.6. Угловое распределение фотоэлектронов.

при $v/c \ll 1$ даётся фактором

$$\frac{\eta^5}{\omega} \propto Z^5 \omega^{-7/2}. \quad (5.77)$$

Угловое распределение фотоэлектронов показано на рис. 5.6 *a*. Ось x соответствует электрическому полю и линейной поляризации световой волны; магнитное поле волны направлено вдоль оси y , в то время как вектор распространения $k = k_z$. При $v \ll c$, большинство электронов выбиваются в направлении электрического поля фотона, тогда как сечение в направлении \mathbf{k} исчезает. С ростом k и, следовательно, скорости v , роль знаменателя (5.76) увеличивается, и лепестки углового распределения наклоняются вперед, рис. 5.6 *b*. Угловое интегрирование в (5.76) дает полное сечение фотоэффекта из K -оболочки, которое может быть представлено как

$$\sigma_K(\text{cm}^2) \approx 10^{-16} Z^5 \left(\frac{13.6}{\hbar\omega(\text{eV})} \right)^{7/2}, \quad E_b \ll \hbar\omega \ll mc^2. \quad (5.78)$$

Наука есть организованная попытка
 человечества понять природу
 причинно-следственных связей
 К.Х. Ваддингтон, *Научный подход*

Глава 6

Дисперсия и рассеяние света

6.1 Макроскопическое описание

В Гл. 5 мы рассматривали взаимодействие электромагнитной волны с системой заряженных частиц, которое приводит к переходам между состояниями системы и изменению энергии волны (поглощение и вынужденное излучение). В этой главе мы обсудим поляризацию среды вследствие распространения в ней электромагнитной волны. Здесь, в отличие от статического случая (Гл. I.23), нас более всего интересует зависимость возникаемого явления от частоты. По сути дела, оно будет частным случаем общей теории линейного отклика квантовой системы на внешнее переменное возмущение.

Чтобы упростить задачу, представим среду, в которой распространяется электромагнитная волна, в виде набора слабо взаимодействующих осцилляторов. В данной модели мы ограничимся случаем длинных волн, в котором поле волны можно считать однородным на размерах атома. Рассмотрим электрическое поле монохроматической волны в классическом пределе немагнитной среды

$$\vec{\mathcal{E}}(t) = \mathbf{e} \mathcal{E} \cos(\omega t) = \mathbf{e} \frac{\mathcal{E}}{2} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}), \quad (6.1)$$

где \mathbf{e} - вектор поляризации. В классической теории электрона заряды, удерживаемые атомом и обладающие определенными собственными частотами, под воздействием волны совершают вынужденные колебания с вынуждающей частотой ω . Если ω приближается к одной из собственных частот осциллятора, возникает резонанс, амплитуды колебаний зарядов и, следовательно, средний дипольный момент среды возрастают - происходит *динамическая поляризация* среды.

Когда волна распространяется в резонансной среде, ее энергия расходуется на возбуждение атомных осцилляторов. Вынужденные колебания атомов

в свою очередь излучают вторичные волны с той же частотой. Интенсивность результирующего поля определяется *интерференцией* падающей и вторичной(рассеянной) волн. В *макроскопическом описании* используется *функция диэлектрической проницаемости* $\varepsilon(\omega)$ [19], § 58 или *показатель преломления* $n(\omega)$,

$$\varepsilon(\omega) = n^2(\omega). \quad (6.2)$$

Описанное выше является одним из примеров обобщенной *восприимчивости* в теории линейных откликов.

В результате взаимодействия волны с веществом закон дисперсии в среде будет отличаться от *закона дисперсии* в вакууме,

$$k = \frac{\omega}{c} \Rightarrow k = \frac{\omega}{c} n(\omega). \quad (6.3)$$

Фазовая скорость волны зависит от частоты,

$$v_{ph}(\omega) = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{n(\omega)}, \quad (6.4)$$

отличается от *групповой скорости* (I.5.22),

$$v_g(\omega) = \frac{d\omega}{dk} = \frac{c}{n} - \frac{ck}{n^2} \frac{dn}{d\omega} = v_{ph} - \frac{\omega}{n} \frac{dn}{d\omega}. \quad (6.5)$$

Данный факт приводит к *дисперсии света* аналогично "расползанию" квантового волнового пакета в Гл.I.5.5. В зависимости от знака величины $dn/d\omega$, говорят о *положительной* ($dn/d\omega < 0$, $v_g > v_{ph}$) или *неотрицательной* ($dn/d\omega > 0$, $v_g < v_{ph}$) дисперсии. В общем случае восприимчивость является комплексной величиной. Мнимая часть $n(\omega)$ отвечает за *затухание* волны в среде:

$$e^{i(kx - \omega t)} \Rightarrow e^{i\omega[(n/c)x - t]} = e^{i(\omega/c)x \operatorname{Re} n - i\omega t - (\omega/c)x \operatorname{Im} n}. \quad (6.6)$$

Нашей задачей является найти квантовое описание данного явления, которое позволит вычислять характеристики среды такие как $\varepsilon(\omega)$ и $n(\omega)$ с точки зрения атомных и молекулярных свойств.

6.2 Линейный отклик

В ограничении длинных волн гамильтониан возмущения может быть записан (*Задача 5.1*) в виде

$$\hat{H}' = -(\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \hat{\mathbf{d}}), \quad (6.7)$$

где $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор дипольного момента атома, а $\vec{\mathcal{E}}(t)$ — классическое внешнее поле (6.1). В действительности теория может быть разработана для любого возмущения в виде $F(t)\hat{O}$ где $F(t)$ — слабое внешнее поле (в теории возмущений все Фурье-компоненты независимы и, таким образом, достаточно рассмотрения монохроматического поля) и \hat{O} — некоторый оператор системы (не являющийся интегралом движения).

Удобно модифицировать монохроматическую временную зависимость (6.1) в предположении, что поле медленно (*адиабатически*) включалось в удаленном прошлом, при $t \rightarrow -\infty$. Это допущение позволит нам избежать рассмотрения реальных переходов связанных с резким возникновением поля в начальный момент времени, и позволит изучить стационарный случай. Опишем подобное поведение поля добавив множитель адиабатического изменения,

$$\hat{H}' \Rightarrow \hat{H}' e^{\eta t}, \quad t \rightarrow -\infty, \quad \eta \rightarrow +0, \quad (6.8)$$

где η — инфинитезимальная положительная величина, которую следует положить равной нулю после всех вычислений наблюдаемых величин. Когда это возможно, мы будем просто писать $+0$ вместо η . Теперь используем обычную нестационарную теорию возмущений, описанную в Гл. 1.2, для вектора состояния в присутствии поля (6.7) в виде разложения по стационарным состояниям $|n\rangle$ невозмущенной системы с энергиями E_n ,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-(i/\hbar)E_n t}. \quad (6.9)$$

Найдем коэффициенты a_n для начального состояния заданного основным состоянием $|0\rangle$ при $t \rightarrow -\infty$,

$$\begin{aligned} a_n(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' H_{n0}(t') e^{i\omega_{n0}t'} \\ &= \frac{\mathcal{E}}{2\hbar} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{n0}) \left[\frac{e^{i(\omega + \omega_{n0})t}}{\omega + \omega_{n0} - i0} - \frac{e^{-i(\omega - \omega_{n0})t}}{\omega - \omega_{n0} + i0} \right] e^{\eta t}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Поляризация системы в нестационарном состоянии, зависящая от времени, задается ожидаемой величиной оператора $\hat{\mathbf{d}}$ (6.9). В линейном приближении по \mathcal{E} получим

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle \equiv \langle \Psi(t) | \hat{\mathbf{d}} | \Psi(t) \rangle = \mathbf{d}_{00} + \sum_{n \neq 0} \{ a_n^*(t) e^{i\omega_{n0}t} \mathbf{d}_{n0} + a_n(t) e^{-i\omega_{n0}t} \mathbf{d}_{0n} \}. \quad (6.11)$$

Подставляя коэффициенты a_n из (6.10), получим

$$\langle \mathbf{d}(t) \rangle = \mathbf{d}_{00} - \frac{\mathcal{E}}{2\hbar} e^{\eta t} \sum_{n \neq 0} \left\{ \left[\frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \omega_{n0} + i0} - \frac{e^{i\omega t}}{\omega + \omega_{n0} - i0} \right] \mathbf{d}_{n0}^* (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{n0}) + \text{с.с.} \right\}. \quad (6.12)$$

Члены, пропорциональные \mathcal{E} представляют собой квантовый аналог классических вынужденных колебаний с частотой возмущения ω . По аналогии со статическим случаем (II.9.8) введем *тензор динамической поляризуемости* как зависящий от времени коэффициент между Фурье-гармониками дипольного момента и электрическим полем (6.1),

$$\langle d_{\omega}^i \rangle = \alpha^{ij}(\omega) \mathcal{E}_{\omega}^j. \quad (6.13)$$

Собирая вместе члены $\propto e^{-i\omega t + \eta t}$ в (6.12), получим

$$\langle \mathbf{d}_{\omega} \rangle = -\frac{\mathcal{E}}{\hbar} \sum_{n \neq 0} \left\{ \frac{\mathbf{d}_{n0}^* (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{n0})}{\omega - \omega_{n0} + i0} - \frac{\mathbf{d}_{n0} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{n0}^*)}{\omega + \omega_{n0} + i0} \right\}, \quad (6.14)$$

и *тензор поляризации*

$$\alpha^{ij}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n \neq 0} \left\{ \frac{(d_{n0}^i)^* d_{n0}^j}{\omega - \omega_{n0} + i0} - \frac{d_{n0}^i (d_{n0}^j)^*}{\omega + \omega_{n0} + i0} \right\}, \quad (6.15)$$

Свойства симметрии данного тензора следующие [сравните с (II.9.8)],

$$\alpha^{ij}(\omega) = \left(\alpha^{ij}(-\omega) \right)^*. \quad (6.16)$$

Такое же выражение с соответствующими заменами матричных элементов может быть получено для поляризуемости системы в начальном состоянии $|i\rangle$, отличном от основного состояния. Естественным расширением расширением является поляризуемость системы в тепловом равновесии, когда необходимо добавить суммирование по начальным состояниям $|i\rangle$ с бoльцмановскими весами $(1/Z)e^{E_i/T}$ (Гл. 5.1).

6.3 Принцип причинности

Если частота ω не является находится в резонансе с частотами переходов ω_{n0} , можно пренебречь бесконечно малой добавкой $i0$ в знаменателях. Тем

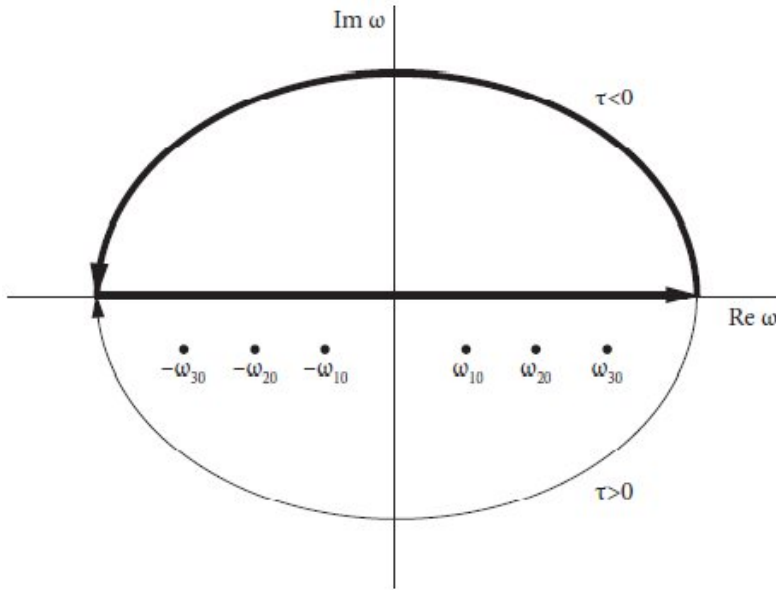


Рис. 6.1. Контуры интегрирования для $\tau < 0$, сплошная дуга, и для $\tau > 0$ — тонкая линия, для причинной восприимчивости.

не менее следует сохранить данный член в случае близости к резонансу. Это связано с физической задачей причинности отклика.

Пусть $\tilde{\alpha}^{ij}(\tau)$ — зависящая от времени функция, такая что функция такая что функция $\alpha^{ij}(\omega)$ является ее Фурье-образом,

$$\tilde{\alpha}^{ij}(\tau) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \alpha^{ij}(\omega) e^{-i\omega\tau}. \quad (6.17)$$

Произведение (6.13) Фурье-компонент в пространстве частот соответствует *свертке* функций во временной области,

$$\langle d^i(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \tilde{\alpha}^{ij}(t-t') \mathcal{E}^j(t'). \quad (6.18)$$

В соответствии с (6.18), ядро $\tilde{\alpha}(t-t')$ определяет влияние поля, приложенного в момент времени t' , на отклик поляризации в момент t .

Как видно из (6.15), система отвечает виртуальными возбуждениями $0 \rightarrow n$ и, затем, обратными переходами $n \rightarrow 0$, так же как и для переизлучения волны классической антенной. При виртуальные переходы в

Гл. I.5.10, энергия не сохраняется, $\Delta E = \omega - |\omega_{n0}| \neq 0$ на коротком временном интервале $\sim \hbar/\Delta E$. Для частот ω вблизи резонанса с частотой перехода ω_{n0} , энергия практически сохраняется, что соответствует почти реальному переходу *на массовой оболочке* в долгоживущее промежуточное состояние. Это проявляется в резонансном росте поляризуемости. Без $i0$, подынтегральное выражение в (6.17) не определено вследствие присутствия сингулярностей в точках резонанса. Добавление $i\eta$ однозначно определяет контур значения интеграла посредством задания контура интегрирования в комплексной плоскости.е. Для $\eta \neq 0$, сингулярности в точках

$$\omega = \pm \omega_{n0} - i\eta \quad (6.19)$$

сдвигаются в *нижнюю* плоскость комплексной переменной ω . В верхней части функция $\alpha(\omega)$ (*аналитична*). При $\tau < 0$ контур интегрирования в (6.17) может быть закрыт большой дугой в *верхней* плоскости, поскольку подынтегральное выражение содержит

$$e^{-i(\text{Re } \omega + i\text{Im } \omega)\tau} \propto e^{-\text{Im } \omega |\tau|}, \quad \tau = -|\tau| < 0, \quad (6.20)$$

которое экспоненциально уменьшается на большой полуокружности с $\text{Im } \omega > 0$. Вследствие аналитичности $\alpha(\omega)$, имеем

$$\tilde{\alpha}(\tau) = 0, \quad \tau < 0. \quad (6.21)$$

Таким образом, в выражении (6.18) интегрирование производится только в области $t > t'$. Это означает, что поле $\mathcal{E}(t')$ способно определить отклик среды только для более поздних моментов времени, $t > t'$. Добавка $+i0$, определяющая правила обхода контура, отражает *причинную зависимость* отклика.

Часто приходится иметь дело с сингулярностями в знаменателе подобными уравнению (6.15). Данные правила вытекают из выделения действительных x и η при $\eta \rightarrow +0$,

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \frac{x \mp i\eta}{x^2 + \eta^2} = \frac{x}{x^2 + \eta^2} \mp i \frac{\eta}{x^2 + \eta^2}. \quad (6.22)$$

Действительная часть $x/(x^2 + \eta^2)$ выражения при $\eta \rightarrow 0$ равна $1/x$ для всех конечных x , тогда как при $x = 0$ она обращается в нуль. Данное выражение является нечетной функцией относительно x и, таким образом, при интегрировании с любой гладкой в $x = 0$ функцией, даст так называемое *главное значение* (P.v.) интеграла,

$$\text{P.v.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x} = \lim_{\eta \rightarrow +0} \left(\int_{-\infty}^{-\eta} + \int_{\eta}^{\infty} \right) \frac{dx}{x} \quad (6.23)$$

уничтожая симметричным образом вклад сингулярности.

Таким образом, получаем

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{x}{x^2 + \eta^2} = \text{P.v.} \frac{1}{x}. \quad (6.24)$$

Мнимая часть выражения (6.22) является четной функцией x и при $\eta \rightarrow +0$ обращается в нуль для любых x кроме $x = 0$, при котором она принимает бесконечное значение. Интеграл этой функции равен π для любых значений η , и, следовательно, мы получаем представление δ -функции с которой мы имели дело в (I.5.80),

$$\lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \pi \delta(x). \quad (6.25)$$

В результаты мы раскрываем обычные сингулярности как

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \text{P.v.} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad \eta \rightarrow +0. \quad (6.26)$$

Разложение (6.26) разделяет виртуальные процессы вне массовой оболочки от реальных процессов на массовой оболочке, которые требуют сохранения энергии, выраженного δ -функцией.

6.4 Функция диэлектрической проницаемости

Используя правило (6.26), мы можем найти действительную и мнимую части поляризуемости (6.15). Предположим для простоты, что основное состояние изотропно

$$\alpha^{ij}(\omega) = \delta_{ij} \alpha(\omega); \quad (6.27)$$

в более общем случае мы должны были бы построить тензорное разложение подобно тому как мы делали это в (I.24.12). (Новый элемент может быть асимметричен относительно комбинации i, j что приведет к аксиальному вектору как в Гл. II.1.9; подобные среды называют *гироскопическими*.)

В изотропном случае (6.27)

$$\alpha(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n \neq 0} |d_{n0}^z|^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i0} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i0} \right). \quad (6.28)$$

Разложение (6.26) дает

$$\text{Re } \alpha(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n \neq 0} |d_{n0}^z|^2 \text{P.v.} \frac{2\omega_{n0}}{\omega^2 - \omega_{n0}^2}, \quad (6.29)$$

$$\text{Im } \alpha(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{n \neq 0} |d_{n0}^z|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (6.30)$$

Здесь мы приняли $\omega > 0$ и предположили, что основное состояние не вырождено т.е. $\omega_{n0} > 0$ и $\delta(\omega + \omega_{n0})$ обращается в нуль при $n \neq 0$.

При температуре не равной нулю оба слагаемых в уравнении (6.28) будут давать ненулевой вклад, поскольку будут возможны так же и переходы на более низкие энергетические уровни вследствие тепловой населенности возбужденных состояний.

Каждый член в мнимой части (6.30) пропорционален частоте дипольного перехода между состояниями $0 \rightarrow n$ вследствие воздействия возмущения. Диэлектрическая проницаемость может быть определена как

$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi N \alpha(\omega), \quad (6.31)$$

где N - количество атомов в единице объема. Легко увидеть, что данное выражение совпадает со стандартным макроскопическим определением [19], § 77 связи

$$\vec{D} = \vec{\mathcal{E}} + 4\pi \vec{P} = \varepsilon \vec{\mathcal{E}} \quad (6.32)$$

между напряженностью электрического поля $\vec{\mathcal{E}}$, электрической индукцией \vec{D} и поляризацией единицы объема \vec{P} в среде слабо взаимодействующих атомов (напр. газ). Поскольку мы не определили, что является источником электрического поля в Гамильтониане возмущения (6.7), предположи, что $\vec{\mathcal{E}}$ — это результирующее электрическое поле, действующее в системе и отождествим его с *макроскопическим* полем в (6.32). Как следует из (6.30), $\text{Im } \alpha > 0$. Следовательно $\text{Im } \varepsilon$ тоже положительно и, учитывая определение (6.2), $\text{Im } n > 0$. Таким образом, в соответствии с (6.6), волна, распространяющаяся в среде, постепенно затухает. Квантовое рассмотрение показывает, что причиной затухания волны, являются потери энергии на резонансное возбуждение атомов.

Можно переписать действительную часть (6.29) с точки зрения *силы осциллятора* F_{n0} (5.29):

$$\text{Re } \alpha(\omega) = -\frac{e^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{F_{n0}}{\omega^2 - \omega_{n0}^2}, \quad (6.33)$$

здесь мы полагаем, что дипольные моменты создаются электронами (массы m) и сингулярности следует рассматривать в смысле главных значений.

Данное представление в точности совпадает с понятием поляризуемости в классической электронной теории где ω_{n0} – собственные частоты атомных осцилляторов, а F_{n0} – эмпирические "силы". В пределе частот, много больших атомных, применяя правило получаем:

$$\operatorname{Re} \alpha(\omega) \rightarrow -\frac{e^2}{m\omega^2} \sum_{n \neq 0} F_{n0} = -\frac{Ze^2}{m\omega^2}, \quad (6.34)$$

где Z – количество электронов на один атом. В этом пределе справедливо классическое решение для свободных зарядов, как и должно быть для электронов со столь большими частотами, при которых можно пренебречь связью электронов с атомом.

Для функции диэлектрической проницаемости (6.31) из (6.33) получим,

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi N \operatorname{Re} \alpha(\omega) = 1 - \frac{4\pi Ne^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{F_{n0}}{\omega^2 - \omega_{n0}^2}, \quad (6.35)$$

Что, в пределе больших частот (6.34) дает

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega) \rightarrow 1 - \frac{4\pi NZe^2}{m\omega^2} \equiv 1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2}. \quad (6.36)$$

Таким образом мы приходим к классическому выражению для диэлектрической проницаемости электронного газа, где

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi ne^2}{m} \quad (6.37)$$

– *плазменная частота*, $n = NZ$ – полная плотность электронов. Здесь неявно предполагается присутствие компенсирующего ионного фона, который обеспечивает электростатическую стабильность системы.

В действительности полученные выражения (6.34) и (6.36) справедливы для любых систем в приближении $\omega \rightarrow \infty$ [19], § 59 (все еще предполагается, что частоты не релятивистские). Для больших ω , показатель преломления среды $n = \sqrt{\varepsilon}$ ведет себя как $\sqrt{1 - \omega_0^2/\omega^2}$. При $\omega < \omega_0$, n – мнимое, что соответствует полному отражению света средой. При $\omega > \omega_0$, коэффициент преломления действителен, что согласуется с ультрафиолетовой прозрачностью металлов для которой модель свободных электронов применима качественно.

Другой предельный случай может быть получен из (6.15) и (6.28) при $\omega \rightarrow 0$. Результат для стационарного случая ($\omega = 0$) естественным образом совпадает с полученным в Гл. II.9.1. В этом случае диэлектрическая

проницаемость

$$\varepsilon(0) = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{F_{n0}}{\omega_{n0}^2}. \quad (6.38)$$

Среда состоящая из слабо взаимодействующих атомов приобретает свойства диэлектрика $\varepsilon(0) > 0$. Для плотных сред рассмотрение, основанное на (6.31) уже не применимо, поскольку невозможно просто добавить поляризуемости отдельных атомов. Локальное поле в среде отличается от макроскопического вследствие наличия поля поляризованных атомов. Подобные коллективные эффекты так же могут приводить к пространственной неоднородности системы. Например, свободно перемещающиеся заряды могут *экранировать* внешний источник поля как в задаче I.1.8. Во многих подобных случаях кроме зависимости $\varepsilon(\omega)$, так же необходимо учитывать зависимость $\varepsilon(\mathbf{k})$ - *пространственную дисперсию* диэлектрической функции [19], § 103).

6.5 Свойства дисперсии

Давайте вновь обратимся к рассмотрению системы слабо взаимодействующих атомов и более внимательно исследуем зависимость ε от частоты. Типичное поведение вещественной части (6.35) показано прямыми линиями на Рис. 6.2.

Вблизи резонансных частот ω_{n0} , где функция $\varepsilon(\omega)$ сингулярна, имеется область *аномальной дисперсии*. Среда прозрачна вплоть до частоты $\omega = \omega_{n0}$. При $\omega > \omega_{n0}$, вещественная часть $\text{Re } \varepsilon(\omega)$ отрицательна – среда становится непроницаемой (полное отражение). На рис. 6.2 дисперсия всегда положительна, $dn/d\omega > 0$. Отрицательная дисперсия могла бы быть возможна, если бы атомы были в возбужденных состояниях, к примеру в тепловом равновесии. В таком случае сила осциллятора (5.27) для перехода в основное состояние отрицательна.

Подобная картина тем не менее не верна непосредственной близости к резонансу, неизбежно присутствует затухание волны вследствие реальных переходов (6.30). В действительности, для поглощения точное равенство $\omega = \omega_{n0}$ не является необходимым. Как обсуждалось в Гл.5.2, возбужденные состояния $|n\rangle$ обладают *естественной шириной* $\Gamma_n = \hbar\gamma_n$. Принимая это во внимание, мы должны произвести замену $\omega_{n0} \rightarrow \omega_{n0} - (i/2)\gamma_n$. В присутствии конечных γ_n мы можем игнорировать $\eta \rightarrow +0$, а $\gamma_n > 0$

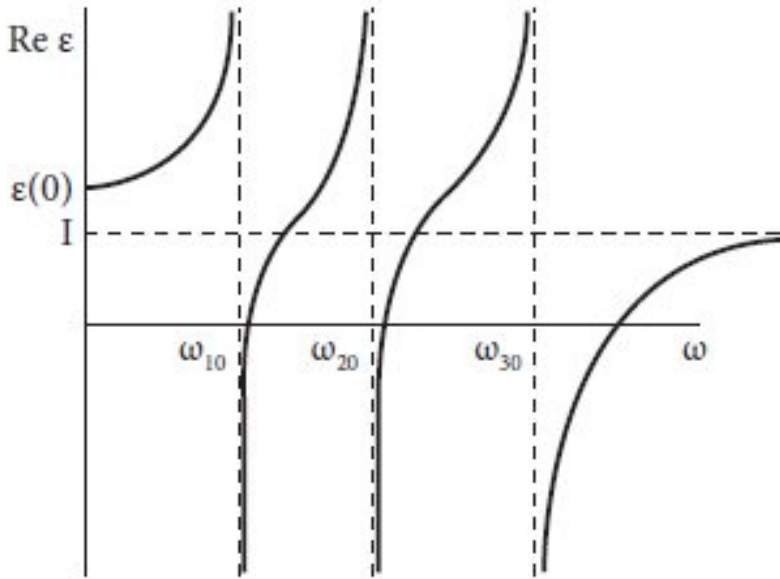


Рис. 6.2. Вещественная часть диэлектрической функции в резонансной области.

обеспечит причинно-следственную связь. Вместо (6.33) получим

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{F_{n0}}{[\omega_{n0} - (i/2)\gamma_n]^2 - \omega^2}. \quad (6.39)$$

Если ширина мала, мы можем произвести дальнейшее разложение сохраняя в знаменателе только линейные по γ_n члены,

$$\alpha(\omega) \approx \frac{e^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{F_{n0}}{\omega_{n0}^2 - \omega^2 - i\omega_{n0}\gamma_n}. \quad (6.40)$$

В таком случае вещественная часть (6.35) диэлектрической функции примет вид:

$$\text{Re } \varepsilon = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{(\omega_{n0}^2 - \omega^2) F_{n0}}{(\omega_{n0}^2 - \omega^2)^2 + \omega_{n0}^2 \gamma_n^2}. \quad (6.41)$$

В отличие от (6.35), $\text{Re } \varepsilon$ не обращается в бесконечность, хотя имеет пик ширины $\sim \gamma_n$ вблизи резонансной области (см. рис. 6.3.).

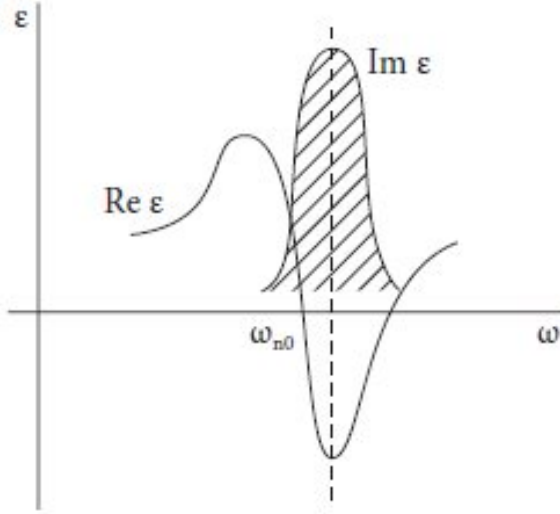


Рис. 6.3. Диэлектрическая функция в резонансной области с учетом ширины.

В такой же области ширины $\sim \gamma_n$, присутствует заметное поглощение,

$$\text{Im } \varepsilon = 4\pi N \text{Im } \alpha = \frac{4\pi N e^2}{m} \sum_{n \neq 0} \frac{\omega_{n0} \gamma_n F_{n0}}{(\omega_{n0}^2 - \omega^2)^2 + \omega_{n0}^2 \gamma_n^2}. \quad (6.42)$$

В пределе исчезающе малых ширин γ_n , вследствие виртуальности (6.25) данное выражение предсказывает набор бесконечно узких линий поглощения соответствующих резонансным частотам.

В непосредственной близости к резонансу преобладает один член суммы (6.42),

$$\text{Im } \alpha(\omega \rightarrow \omega_{n0}) \approx \frac{e^2}{m} \frac{F_{n0} \omega_{n0} \gamma_n}{4\omega_{n0}^2 [(\omega - \omega_{n0})^2 + \gamma_n^2/4]}, \quad (6.43)$$

или, с учетом явной формы силы осциллятора (5.27),

$$\text{Im } \alpha(\omega \rightarrow \omega_{n0}) \approx \frac{|d_{n0}^x|^2 \gamma_n}{2\hbar^2 [(\omega - \omega_{n0})^2 + \gamma_n^2/4]}, \quad (6.44)$$

Сравнивая данное выражение с сечением (5.19), полученным в дипольном приближении, мы видим, что сечение фотопоглощения системой атомов

определяется *мнимой* частью поляризуемости (например для света, поляризованного вдоль оси x),

$$\sigma_{\text{abs}}(0 \rightarrow n) = \frac{4\pi^2}{c} \frac{|d_{n0}^x|^2}{2\pi} \frac{\gamma_n}{(\omega - \omega_{n0})^2 + \gamma_n^2/4} = \frac{4\pi\omega}{c} \text{Im } \alpha(\omega \rightarrow \omega_{n0}). \quad (6.45)$$

Данное выражение является одним из представлений *оптической теоремы* описанной в разделе 8.8.

Задача 6.1

Покажите классический смысл оптической теоремы (сохранение светового потока).

6.6 Квантовое затухание

Более точные вывод возникновения ширин в теории линейного отклика может быть получено, если мы вернемся к общему подходу (1.9) к рассмотрению нестационарных возмущений (*теория квантового затухания*, В. Вайскопф, Е. Вигнер, 1930). Проиллюстрируем данный подход в простейшем случае, справедливом вблизи узкого резонанса.

Амплитуда $a_n(t)$ обнаружения системы в нестабильном возбужденном состоянии $|n\rangle$ уменьшается с временем как

$$a_n(t) = a_n(0)e^{-(1/2)\gamma_n t}. \quad (6.46)$$

Тогда амплитуда $a_0(t)$ основного состояния (или другого состояния связанного с состоянием $|n\rangle$ путем излучения фотона) определяется выражением (1.9). Т.к. энергия основного состояния + энергия фотона равна $E_0 + \hbar\omega$, по теории возмущений получим

$$i\hbar\dot{a}_0 = \langle 0|\hat{H}'|n\rangle e^{(i/\hbar)(E_0 + \hbar\omega - E_n)} a_n(t) = \langle 0|\hat{H}'|n\rangle e^{i(\omega - \omega_{n0} + i\gamma_n/2)t} a_n(0). \quad (6.47)$$

Учитывая начальные условия $a_n(0) = 1$ и $a_0(0) = 0$,

$$a_0(t) = \langle 0|\hat{H}'|n\rangle \frac{1 - e^{i(\omega - \omega_{n0})t - \gamma_n t/2}}{\hbar(\omega - \omega_{n0} + i\gamma_n/2)}. \quad (6.48)$$

Вероятность излучения в интервале $d\omega$ на больших временах t (больших чем время жизни $1/\gamma_n$) дается выражением

$$dw_{0n} = \frac{|\langle 0|\hat{H}'|n\rangle|^2}{\hbar^2[(\omega - \omega_{n0})^2 + \gamma_n^2/4]} d\omega. \quad (6.49)$$

При суммировании по поляризациям фотона и интегрировании по плотности конечных состояний (помеченных ниже как \int) мы можем использовать золотое правило вероятности перехода (2.6), которое определяет ширину γ_n как вероятность распада в единицу времени,

$$\gamma_n = \frac{2\pi}{\hbar^2} \int |\langle 0 | \hat{H}' | n \rangle|^2. \quad (6.50)$$

В конечном итоге получим вероятность (6.49) в виде

$$dw_{0n} = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_n}{(\omega - \omega_{n0})^2 + \gamma_n^2/4} d\omega, \quad (6.51)$$

где δ -функция сохранения энергии заменена функцией Лоренца. Если у состояния $|n\rangle$ есть другие каналы распада, то знаменатель в (6.51) должен включать в себя полную ширину, тогда как числитель представляет собой *парциальную ширину* $\gamma_{n \rightarrow 0}$ соответствующую излучению $|n\rangle \rightarrow |0\rangle$.

Задача 6.2

Покажите, что для перехода между состояниями $|n'\rangle$ и $|n\rangle$, имеющими ширины $\gamma_{n'}$ и γ_n соответственно, в приближении теории затухания форма спектральной линии для перехода $n' \rightarrow n$ дается выражением (6.51) с заменой $\gamma_n \rightarrow \gamma_n + \gamma_{n'}$, как это предполагалось в (5.20).

Решение Пусть ширина γ_n будет обусловлена переходом в основное состояние $|0\rangle$ с частотой $\omega' \approx \omega_{n0}$. Тогда по теории возмущения аналогично (6.51) для двойного перехода $n' \rightarrow n \rightarrow 0$ получим

$$d\omega = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar^4} \frac{\gamma_{n'} \gamma_n}{[(\omega' - \omega_{n0})^2 + \gamma_n^2/4][(\omega + \omega' - \omega_{n'0})^2 + \gamma_{n'}^2/4]} d\omega d\omega'. \quad (6.52)$$

Теперь проинтегрируем по ω' , например замыкая контур в верхней полуплоскости комплексной переменной ω' и производя суммирование и вычетов в $\omega' = \omega_{n0} + i\gamma_n/2$ и $\omega' = \omega_{n'0} - \omega + i\gamma_{n'}/2$. Результатом свертки двух функций Лоренца будем функция Лоренца с шириной, равной сумме ширин изначальных функций,

$$dw = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_n + \gamma_{n'}}{(\omega - \omega_{n'n})^2 + (\gamma_{n'} + \gamma_n)^2/4} d\omega. \quad (6.53)$$

6.7 Дисперсионные соотношения

Принцип причинности математически основывается на аналитичности функций восприимчивости, таких как динамическая поляризуемость $\alpha(\omega)$, в верхней полуплоскости комплексной частоты. Из данного свойства вытекают важные соотношения между вещественной и мнимой частями функции отклика.

Применяя тождество (6.26) к поляризуемости, получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\alpha(\omega')}{\omega' - \omega + i0} = \text{P.v.} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\alpha(\omega')}{\omega' - \omega} - i\pi\alpha(\omega). \quad (6.54)$$

С другой стороны интеграл (6.54) равен нулю. Действительно, мы можем замкнуть контур интегрирования большой дугой в *верхней* полуплоскости, т.к. вдоль этой дуги вклад в интеграл обращается в нуль вследствие быстрого уменьшения поляризуемости (6.34) на больших частотах. Внутри полученного таким образом контура подынтегральное выражение не имеет сингулярностей – в соответствии с (6.28) полюсы поляризуемости расположены в *нижней* плоскости. Здесь мы видим важность адиабатического включения поля. Таким образом выражение (6.54) показывает, что

$$\alpha(\omega) = -\text{P.v.} \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\alpha(\omega')}{\omega' - \omega}. \quad (6.55)$$

Разделяя вещественную и мнимую части, мы приходим к *дисперсионным соотношениям Крамерса-Кронига*:

$$\text{Re } \alpha(\omega) = \text{P.v.} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im } \alpha(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad (6.56)$$

$$\text{Im } \alpha(\omega) = -\text{P.v.} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Re } \alpha(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad (6.57)$$

Несложно явным образом убедиться, что функция (6.28) удовлетворяет дисперсионным соотношениям.

Задача 6.3

Соотношения (6.56) и (6.57) согласованы только если

$$\text{P.v.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{(\omega' - \omega)(\omega' - \omega'')} = \pi^2 \delta(\omega - \omega''). \quad (6.58)$$

Докажите это утверждение.

Поскольку принцип причинности имеет очень общий характер, любая функция отклика должна удовлетворять дисперсионным соотношениям. Тем не менее их конкретный вид может изменяться в зависимости от асимптотического поведения восприимчивости при $\omega \rightarrow \infty$, как мы видели в доказательстве рассмотренном выше.

Задача 6.4

Получите дисперсионные соотношения для диэлектрической функции и докажите что

$$\int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{Im} \varepsilon(\omega) = \frac{\pi}{2} \omega_0^2, \quad (6.59)$$

где ω_0 — плазменная частота (6.37).

6.8 Формализм рассеяния

Рассеяние света квантовой системой тесно связано с явлением дисперсии рассмотренным в предыдущих разделах. Можно интерпретировать рассеяние в терминах виртуального поглощения и излучения фотонов. В данном разделе нас больше интересует *рассеянная волна* нежели чем свойства отклика среды. Рассеянная (вторичная, переизлученная) волна в общем случае имеет параметры (частота, направление распространения, поляризация) отличные от первичной волны. Рассеяние так же возможно на свободной частице, в том случае когда реальное поглощение запрещено законами сохранения.

Процесс рассеяния вовлекает как минимум два элементарных действия: поглощение первичного фотона $(\mathbf{k}, \omega = ck, \lambda)$ и излучение вторичного $(\mathbf{k}, \omega = ck, \lambda)$. Соответствующие матричный элемент содержит оператор $\hat{a}_{\lambda\mathbf{k}}$ аннигиляции начального фотона и оператор рождения конечного фотона $\hat{a}_{\lambda'\mathbf{k}'}^\dagger$. Рассмотрение взаимодействия волны на атомах в рамках теории возмущения требует учитывать второй порядок по Гамильтониану \hat{H}'_1 (см. (4.113) и (4.114)) или \hat{H}'_s в (4.115). Матричный элемент второго порядка для перехода $i \rightarrow f$, в соответствии с (2.16) включает в себя прохождение через промежуточное виртуальное состояние n ,

$$M_{fi}^{(2)} = \sum_n \frac{H'_{fn} H'_{ni}}{W_i - W_n}, \quad (6.60)$$

Здесь $W_i = E_i + \hbar\omega$ — начальная энергия, а W_n — полная энергия промежуточного состояния (система + фотоны).

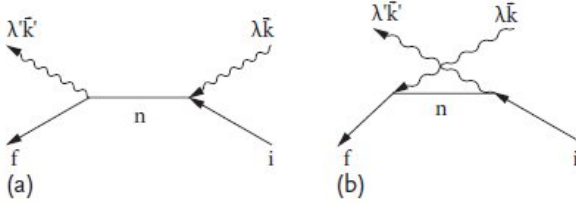


Рис. 6.4. Диаграммы второго порядка для процесса рассеяния.

Начальное состояние включает в себя атом $|i\rangle$ и налетающий квант $(\lambda\mathbf{k})$, конечное состояние включает в себя атом $|f\rangle$ и квант $(\lambda'\mathbf{k}')$. Дважды действуя оператором \hat{H}'_1 мы видим, что существует два пути от начального к конечному состоянию (см Рис. 6.4.). Процесс (a) включает в себя поглощение начального фотона с последующим излучением конечного фотона. Здесь промежуточное состояние не содержит фотонов, тогда как атом находится в состоянии $|n\rangle$ таким образом, что $W_n^{(a)} = E_n$. Могут присутствовать наблюдающие фотоны, которые не меняют своего состояния и, таким образом, не содержатся в знаменателе (6.60). Во вкладе (b) атом сперва излучает конечный фотон, а затем поглощает начальный. Здесь промежуточное состояние содержит в себе атом $|n\rangle$ и два фотона, $W_n^{(b)} = E_n + \hbar\omega + \hbar\omega'$. Теперь мы можем явным образом записать матричные элементы как $M_{fi}^{(a,b)} = (2\pi\hbar c^2)/[V\sqrt{\omega\omega'}]X_{a,b}$, где

$$X_a = \sum_n \frac{\langle f | \sum_a (e_a/m_a c) (\mathbf{e}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_a)} | n \rangle \langle n | \sum_b (e_b/m_b c) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_b) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_b)} | i \rangle}{E_i + \hbar\omega - E_n}, \quad (6.61)$$

и

$$X_b = \sum_n \frac{\langle f | \sum_a (e_a/m_a c) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_a)} | n \rangle \langle n | \sum_b (e_b/m_b c) (\mathbf{e}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}_b) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_b)} | i \rangle}{E_i + \hbar\omega - (E_n + \hbar\omega + \hbar\omega')}, \quad (6.62)$$

Производя суммирование данных вкладов, получим

$$M_{fi}^{(1)} = M_{fi}^{(a)} + M_{fi}^{(b)} = \frac{2\pi}{V\sqrt{\omega\omega'}} \sum_{ab} \frac{e_a e_b}{m_a m_b} \sum_n (A_{fni} + B_{fni}), \quad (6.63)$$

$$A_{fni} = \frac{\left(e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_a)} (\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e}^*) \right)_{fn} \left(e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_b)} (\hat{\mathbf{p}}_b \cdot \mathbf{e}) \right)_{ni}}{\omega - \omega_{ni}}, \quad (6.64)$$

$$B_{fni} = \frac{\left(e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a)}(\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e})\right)_{fn} \left(e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_b)}(\hat{\mathbf{p}}_b \cdot \mathbf{e}'^*)\right)_{ni}}{\omega' + \omega_{ni}}. \quad (6.65)$$

Теперь мы должны вспомнить, что Гамильтониан взаимодействия фотонов с веществом содержит также квадратичный по \mathbf{A} член (4.114). Так как линейный по \mathbf{A} член учтен во *втором* порядке, в таком же приближении мы должны включить вклад *первого* порядка от квадратичного члена. Соответствующий матричный элемент показывает, рис. 6.4с,

$$M_{fi}^{(2)} = \frac{2\pi\hbar}{V\sqrt{\omega\omega'}}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*) \left\langle f \left| \sum_a \left(\frac{e_a}{m_a}\right)^2 e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_a} \right| i \right\rangle. \quad (6.66)$$

Полная амплитуда дается суммированием (6.63) и (6.66). Здесь мы ограничиваемся приближением больших длин волн (дипольное приближение) [в противном случае следует также включить спиново-магнитный член \hat{H}'_s , ур. (4.115)]. В дипольном приближении мы пренебрегаем неоднородностью поля волны на атомных размерах и берем все показатели в точке \mathbf{R} центра атома. Вклад (6.66) таким образом существует для процесса *когерентного рассеяния* без изменений системы, $i = f$. Следовательно в дипольном приближении мы получаем амплитуду рассеяния виде

$$M_{fi} = M_{fi}^{(1)} + M_{fi}^{(2)} = \frac{2\pi}{V\sqrt{\omega\omega'}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}} \sum_{ab} \frac{e_a e_b}{m_a m_b} \times \\ \times \left\{ \sum_n \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e}'^*)_{fn} (\hat{\mathbf{p}}_b \cdot \mathbf{e})_{ni}}{\omega - \omega_{ni}} - \frac{(\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e})_{fn} (\hat{\mathbf{p}}_b \cdot \mathbf{e}'^*)_{ni}}{\omega' + \omega_{ni}} \right] + \hbar(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*) \delta_{fi} \delta_{ab} \right\}. \quad (6.67)$$

Вероятность рассеяния определяется по золотому правилу,

$$d\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \delta(E_i + \hbar\omega - E_f - \hbar\omega') d\rho_f \hbar d\omega', \quad (6.68)$$

и плотности конечных состояний фотонов (2.49).

6.9 Сечение рассеяния

Дифференциальное сечение рассеяния в телесном угле может быть получено из (6.68) путем интегрирования по всем энергиям конечных фотонов

и деления на величину потока налетающих фотонов c/V (один фотон на объем V),

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \frac{V\omega'^2}{8\pi^3\hbar c^3} \frac{V}{c} = \frac{V^2\omega'^2}{4\pi^2\hbar^2 c^4} |M_{fi}|^2. \quad (6.69)$$

Преобразуем это выражение к общепринятой форме используя сперва коммутатор

$$[(\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{e}'^*), (\hat{\mathbf{r}}_b \cdot \mathbf{e})] = e_i'^* e_j [\hat{p}_{ia}, \hat{r}_{jb}] = -i\hbar \delta_{ab} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*). \quad (6.70)$$

Применяя (6.70), вклад в амплитуду (6.67) от $M_{fi}^{(2)}$ может быть представлен в виде суммы по промежуточным состояниям

$$\hbar \delta_{fi} \delta_{ab} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*) = i \sum_n \left((\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{e}'^*)_{fn} (\mathbf{r}_b \cdot \mathbf{e})_{ni} - (\mathbf{r}_b \cdot \mathbf{e})_{fn} (\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{e}'^*)_{ni} \right). \quad (6.71)$$

Если мы подставим данное выражение вместо последнего члена в выражение (6.67) и, предполагая отсутствие сил, зависящих от скорости, с помощью (5.25) введем матричные элементы дипольного момента $\mathbf{d} = \sum_a e_a \mathbf{r}_a$, амплитуда преобразуется к виду

$$M_{fi} = \frac{2\pi}{V\sqrt{\omega\omega'}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}} \sum_n \left(C_{fni} + D_{fni} \right), \quad (6.72)$$

$$C_{fni} = (\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}'^*) (\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}) \omega_{fn} \left(-1 - \frac{\omega_{ni}}{\omega - \omega_{ni}} \right), \quad (6.73)$$

$$D_{fni} = (\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}) (\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}'^*) \omega_{ni} \left(\frac{\omega_{fn}}{\omega' + \omega_{ni}} + 1 \right). \quad (6.74)$$

Можно добиться дальнейшего упрощения применив закон сохранения энергии (путем умножения матричного элемента на δ -функцию от энергии),

$$\omega_{fi} = \omega - \omega'. \quad (6.75)$$

Применяя (6.75), находим

$$\begin{aligned} \omega_{fn} \left(-1 - \frac{\omega_{ni}}{\omega - \omega_{ni}} \right) &= -\omega_{fn} \frac{\omega}{\omega - \omega_{ni}} \\ &= -\omega \left(1 + \frac{\omega_{fi} - \omega}{\omega - \omega_{ni}} \right) = \omega \left(\frac{\omega'}{\omega - \omega_{ni}} - 1 \right) \end{aligned} \quad (6.76)$$

и

$$\begin{aligned}\omega_{ni} \left(1 + \frac{\omega_{fn}}{\omega' + \omega_{ni}}\right) &= \omega_{ni} \frac{\omega_{fi} + \omega'}{\omega' + \omega_{ni}} \\ &= (\omega_{fi} + \omega') \left(1 - \frac{\omega'}{\omega' + \omega_{ni}}\right) = \omega \left(-\frac{\omega'}{\omega' + \omega_{ni}} + 1\right).\end{aligned}\quad (6.77)$$

Следовательно выражения (6.73) и (6.74) преобразуются к виду

$$C_{fni} = \omega\omega' \left[\frac{(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}^{*})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e})}{\omega - \omega_{ni}} - \frac{(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}^{*})}{\omega' + \omega_{ni}} \right], \quad (6.78)$$

$$D_{fni} = -\omega [(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}^{*})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}) - (\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}^{*})]. \quad (6.79)$$

Тем не менее вклад от (6.79) исчезает как коммутатор,

$$\sum_n [(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}^{*})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}) - (\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}^{*})] = \langle f | [(\hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{e}^{*}), (\mathbf{d} \cdot \mathbf{e})] | i \rangle = 0. \quad (6.80)$$

В конечном итоге, на энергетической оболочке (6.75),

$$M_{fi} = \frac{2\pi}{V} \sqrt{\omega\omega'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}} \sum_n \left[\frac{(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}^{*})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e})}{\omega - \omega_{ni}} - \frac{(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}^{*})}{\omega' + \omega_{ni}} \right]. \quad (6.81)$$

Задача 6.5

Получите такой же результат (6.81) с самого начала используя дипольный Гамильтониан (5.27).

Теперь сечение (6.69) дается дисперсионной формулой Крамерса-Гейзенберга, 1925,

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\omega} = \frac{\omega\omega'^3}{\hbar^2 c^4} \left| \sum_n \left[\frac{(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}^{*})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e})}{\omega - \omega_{ni}} - \frac{(\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}^{*})}{\omega' + \omega_{ni}} \right] \right|^2. \quad (6.82)$$

Данный результат справедлив для рассеяния в оптическом, ультрафиолетовом диапазонах и для мягких рентгеновских лучей когда $\hbar\omega < mc^2$ и можно пренебречь релятивистскими эффектами, тогда как длина волны начального и конечного фотонов больше атомных размеров. Как нам известно из теории дисперсии, подход теории возмущений в подобном виде справедлив только для частот далеких от резонанса; иначе необходимо включить естественную ширину квазистационарных состояний.

6.10 Когерентное рассеяние

В случае *когерентного* (упругого) рассеяния, атомы остаются в начальном состоянии $f = i$ и частота фотона не изменяется $\omega' = \omega$. Формула дисперсии дает

$$\frac{d\sigma_i}{d\omega} = \frac{\omega^4}{\hbar^2 c^4} \left| \sum_n \left[\frac{(\mathbf{d}_{in} \cdot \mathbf{e}'^*)(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e})}{\omega - \omega_{ni}} - \frac{(\mathbf{d}_{in} \cdot \mathbf{e})(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}'^*)}{\omega' + \omega_{ni}} \right] \right|^2. \quad (6.83)$$

Сравнение с выражением (6.15) показывает, что сечение когерентного рассеяния полностью определяется тензором поляризуемости в данном состоянии $|i\rangle$,

$$\frac{d\sigma_i}{d\omega} = \frac{\omega^4}{c^4} |e_i e_j'^* \alpha^{ij}(\omega)|^2, \quad (6.84)$$

или для изотопического состояния $|i\rangle$, в соответствии с (6.27),

$$\frac{d\sigma_i}{d\omega} = \frac{\omega^4}{c^4} |\alpha(\omega)|^2 (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*)^2. \quad (6.85)$$

Данный результат имеет классический вид: наведенный дипольный момент $\mathbf{d} = \alpha \vec{\mathcal{E}}$, а сечение пропорционально $|\ddot{\mathbf{d}}|^2 \propto \omega^4 |\alpha|^2$. Квантовые свойства сосредоточены в поляризованности определяемой квантовой структурой атомов.

Если частота ω велика в сравнении с атомными частотами (но длина волны все еще больше размеров атома), то рассеяние происходит таким же образом как на свободных зарядах. Применяя асимптотическое значение поляризуемости (6.34), мы приходим к результатам классической электронной теории [11], § 78, *Томпсоновское рассеяние*,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\omega} \right)_{\omega \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{\omega^4}{c^4} \left(\frac{Ze^2}{m\omega^2} \right)^2 (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*)^2 = Z^2 r_0^2 (\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*)^2, \quad (6.86)$$

где введен *классический радиус частицы* (1.40). Обращаясь обратно к начальному матричному элементу (6.67), видим, что рассеяние на свободных зарядах полностью определяется квадратичным членом \hat{H}'_2 , поскольку выражение в квадратных скобках в (6.67) обращается в нуль в пределе $\omega \rightarrow \infty$.

Для описания упругого рассеяния можно ввести *амплитуду рассеяния* f , которая зависит от угла рассеяния и поляризации начального и рассеянного

фотонов. Амплитуда рассеяния имеет размерность длины и нормирована таким образом, что дифференциальное сечение *упругого рассеяния* равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2. \quad (6.87)$$

Уравнение (6.85) показывает, что для изотропных систем

$$f = \frac{\omega^2}{c^2} \alpha(\omega)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}'^*). \quad (6.88)$$

6.11 Резонансная флуоресценция

При приближении к резонансу $\omega \rightarrow \omega_{ni}$, сечение (6.82) неограниченно растёт. Как и при рассмотрении эффектов дисперсии, данный неограниченный рост происходит из-за того, что мы пренебрегли затуханием связанным с возбуждением атомных состояний.

Вблизи резонанса необходимо учесть естественную ширину линии. Этого можно добиться заменой $E_n \rightarrow E_n - (i\hbar/2)\gamma_n$. Основной (резонансный) член в дисперсионной формуле принимает вид

$$\left(\frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega} \right)_{\text{res}} = \frac{\omega\omega'^3}{\hbar^2 c^4} \left| \sum_{\nu_n} (\mathbf{d}_{fn} \cdot \mathbf{e}'^*)(\mathbf{d}_{ni} \cdot \mathbf{e}) \right|^2 \frac{1}{(\omega - \omega_{ni})^2 + \gamma_n^2/4}, \quad (6.89)$$

где \sum_{ν_n} означает суммирование по всем состояниям с энергией резонанса E_n , например по проекция момента импульса если $J_n \neq 0$. Форма линии предсказанная (6.89) совпадает с формой в процессе спонтанного излучения фотона энергии ω_{ni} возбужденным атом в состоянии $|n\rangle$, если возможно пренебречь шириной состояния $|i\rangle$. Результат (6.89) применим в случае *широкого* разброса по частоте падающей волны который должен превысить ширину γ_n . Для падающей волны с очень узким разбросом частот, линия рассеяния будет еще более узкой чем естественная ширина, если вспомнить наши качественные рассуждения в Гл. I.5.8 и I.5.9. Так же мы обсуждали возможность резонансной флуоресценции атомов и ядер в силу эффекта Мёсбауэра.

Наглядное представление процесса, данное на рис. 6.4, изображает резонансное возбуждение промежуточного состояния $|n\rangle$ и спонтанное снятие возбуждения. Полностью когерентный процесс *резонансной флуоресценции*, когда

$f = i, \omega' = \omega$ и $\mathbf{e}' = \mathbf{e}$, может быть связан с интенсивностью I_ω спонтанного излучения (5.48), или естественной шириной промежуточного состояния γ_n и его средним временем жизни τ_n ,

$$\gamma_n = \frac{1}{\tau_n} = \frac{I_\omega}{\hbar\omega} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{ni}|^2. \quad (6.90)$$

В эксперименте, когда не регистрируются поляризация света и проекции момента импульса атомов среды, наблюдаемое сечение должно быть *усреднено* по подобным параметрам начального состояния электромагнитного поля и атомов, а так же *просуммировано* по конечным параметрам.

Задача 6.6

Покажите, что сечение резонансной флуоресценции определенное описанным способом и проинтегрированное по всем направлениям \mathbf{k}' конечного фотона равно

$$\sigma_{\text{res}} = \frac{2J_n + 1}{2(2J_i + 1)} \frac{\pi}{k^2} \frac{\gamma_n^2}{(\omega - \omega_{ni})^2 + \gamma_n^2/4}, \quad (6.91)$$

где $k = \omega/c$.

В соответствии с (6.91), сечение непосредственно в резонансе,

$$\sigma_{\text{res}} = \frac{2J_n + 1}{2(2J_i + 1)} \frac{4\pi}{k^2}, \quad (6.92)$$

по порядку величины равно квадрату длины волны фотона и не зависит от особенностей системы. Как мы увидим в дальнейшем в Гл.10, это максимально возможное квантовое сечение рассеяния.

Взаимосвязь (6.85) между сечением рассеяния и поляризуемостью $\alpha(\omega)$ верно так же и в присутствии резонанса. Тем не менее, поляризуемость наряду с амплитудой f (6.88) в данном случае становятся *комплексными*. В то же время мнимая часть $\alpha(\omega)$ определяет реальное поглощение света системой. Сравнение (6.88) и (6.45) демонстрирует примечательную связь между поглощением фотонов, которое является *полным* сечением σ всех процессов ослабления падающего пучка, и мнимой частью *упругой* амплитуды для излучения вперед без изменения характеристик фотона, $\mathbf{e}' = \mathbf{e}$,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f. \quad (6.93)$$

Мы вновь возвращаемся к *оптической теореме* в обобщенном рассмотрении (Гл. 34), задачи рассеяния с точки зрения квантовой *унитарности*.

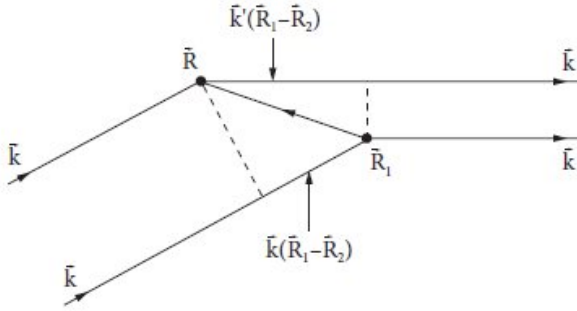


Рис. 6.5. Когерентное рассеяние на двух центрах.

6.12 Рассеяние на множественных центрах

Состояние с определенным количеством фотонов, как и наш одиночный рассеянный фотон, не аналогично осцилляции с определенной фазой. Для этой цели нам нужно когерентное состояние (Гл. I.12.4), которое не обладает фиксированным количеством квантов. Тем не менее в присутствии нескольких центров рассеяния, разность фаз волн, рассеянных на разных центрах может принимать определенные значения. При когерентном рассеянии, атомы остаются в начальных состояниях. Таким образом, процесс когерентного рассеяния на различных атомах физически *неразличимы* и необходимо складывать *амплитуды*, а не сечения рассеяния на разных центрах.

Пусть два идентичных атом в одинаковых квантовых состояниях расположены таким образом, что координаты их центров \mathbf{R}_1 и \mathbf{R}_2 . Как видно из матричного элемента (6.81), полная амплитуда пропорциональна

$$M \propto e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_1} + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_2}. \quad (6.94)$$

Полная вероятность в этом случае определяется результатом интерференции,

$$|M|^2 \propto \left| 1 + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)} \right|^2 = 2\{1 + \cos[(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)]\}, \quad (6.95)$$

которая зависит от разницы хода двух рассеянных волн (Рис. 6.5). Сравните с обсуждением форм-фактора рассеяния заряженных частиц, данным в Гл. 3.3. Таким образом, подобное рассеяние является *когерентным*.

Несложно перейти к рассеянию на упорядоченном наборе атомов, таком как идеальный кристалл. Допустим, идентичные атомы расположены

в узлах кристаллической решетки $\{\mathbf{R}_j\}$. Полная амплитуда рассеяния определяется интерференцией волн, рассеянных на различных центрах,

$$M \propto \sum_j e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j)}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'. \quad (6.96)$$

Таким образом, рассеяние исследует систему на длинах волн соответствующих передаче импульса \mathbf{q} . В большом кристалле, сумма (6.96) обращается в нуль для всех векторов \mathbf{q} кроме векторов \mathbf{K} (I.8.51) *обратной решетки* для которых

$$e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_j)} = 1, \quad (\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_j) = 2\pi n, \quad (6.97)$$

где \mathbf{R}_j – любой вектор исходной решетки, в n – целое.

При когерентном рассеянии на решетке, $k' = k$ и передача импульса равна (3.23) $q = 2k \sin \theta/2$, где θ – угол рассеяния. Условие $\mathbf{q} = \mathbf{K}$ выражает усиливающую интерференцию волн, рассеянных на различных плоскостях кристаллической решетки. Данное условие может быть выполнено только при $2k \geq K_{\min}$. Рассматривая для простоты кубическую решетку с периодом a ,

$$K = \frac{2\pi}{a} n, \quad K_{\min} = \frac{2\pi}{a}, \quad (6.98)$$

когерентное рассеяние возможно только при $k > \pi/a$, т.е. или для рентгеновских лучей или для еще более малых длин волн. Хотя при произвольной ориентации монокристаллического образца по отношению к падающей монохроматической волне, условие $\mathbf{q} = \mathbf{K}$ не удовлетворяется для любых углов рассеяния, данное условие и наблюдение дифракции рентгеновских лучей могут быть достигнуты либо поворотом образца либо использованием поликристаллического образца. *Условие Брэгга* для когерентного рассеяния может быть записано следующим образом

$$2k \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2\pi}{a} n \quad \Rightarrow \quad n\lambda = 2a \sin \frac{\theta}{2}. \quad (6.99)$$

Результат может зависеть от формы кристалла если сечение сравнимо с его геометрической площадью.

Рассеяние с изменением состояния атома $i \neq f$ называют *рамановским рассеянием* (некогерентным). Впервые оно было почти одновременно наблюждено Г.С. Ландсбергом и Л.И. Мандельштамом в кристаллах и Ч.В. Раманом в жидкостях в 1928 г. Поскольку в принципе можно определить

какой именно атом был возбужден в процессе рассеяния, следует складывать *сечения*, а не амплитуды соответствующие различным центрам рассеяния. Если N атомов расположены в объеме небольших размеров в сравнении с длиной волны излучения, $R \ll \lambda$, когерентное сечение будет больше атомного в $\sim N^2$ раз, тогда как некогерентное рассеяние будет больше всего лишь в $\sim N$ раз.

Одним из наиболее фундаментальных инструментов физики используемых для исследования атомных и субатомных областей является рассеяние известных частиц на образце исследуемого элемента.

Р.Л. Либов, *Введение в квантовую механику*

Глава 7

Основы квантовой теории рассеяния

7.1 Рассеяние и наблюдаемые

Львиная доля наших знаний о взаимодействии частиц с другими частицами, ядрами, атомами, молекулами и конденсированным веществом получена из экспериментов по рассеянию. Теоретическая формулировка задачи рассеяния непосредственно следует из типичной экспериментальной постановки.

Схематически процесс рассеяния протекает в следующем образом. Пучок частиц в определенном начальном состоянии $|i\rangle$ получают из удалённого источника. Пучок характеризуется импульсом \mathbf{p} частиц пучка, *снарядов*, или импульсной функцией распределения, а также всеми внутренними квантовыми числами, такими как спин, которые также могут быть заданы вероятностным образом. Частицы считаются на *энергетической поверхности*, или на *массовой поверхности*, то есть это реальные свободно движущиеся частицы с обычным соотношением между их энергией и импульсом, в отличие от *внемассовых* виртуальных частиц, которые появляются в промежуточных короткоживущих состояниях, см. Т. 1, раздел 5.10. Строго говоря, мы никогда не имеем дело с плоской волной, имеющей определенный импульс. Частицы пучка должны описываться *волновыми пакетами* имеющими разброс импульсов и координат в соответствии с принципом неопределенности. Но, регистрирующий прибор имеет конечные размеры и обычно неопределенность импульса перекрывается угловым разрешением детектора, хотя могут быть редкие ситуации, когда структура пакета имеет решающее значение. Во всяком случае, можно использовать идеализированную плоскую волну в качестве базиса, который позволяет восстановить рассеяние пакета пользуясь принципом суперпозиции.

Исходный пучок вступает в взаимодействие с *мишенью*, которой в частности, может быть еще один пучок (эксперименты на *встречных пучках*).

Взаимодействие происходит в микроскопической области, где мы не можем установить наши детекторы. После взаимодействия, продукты снова свободные частицы, может быть другого типа, или в других внутренних состояниях. Регистрируется только набор характеристик свободных частиц в конечном состоянии $|f\rangle$. Для данного начального состояния $|i\rangle$, задачей квантовой теории рассеяния является предсказание вероятности различных возможных конечных состояний. В конечном счёте, используя эмпирические данные, мы стараемся извлечь информацию о механизме взаимодействия и структуре взаимодействующих частиц. Здесь мы ограничимся столкновениями двух тел, хотя в плотной среде одновременное взаимодействие большего числа частиц может иметь важное значение; есть также многочастичные силы, которые не проявляются в парных взаимодействиях. Количество конечных продуктов может быть произвольным, но мы, в основном, будем рассматривать типичные процессы с двумя начальными и двумя конечными частицами.

В разделе 3 обсуждалось рассеяние, как приложение, зависящей от времени теории возмущений. На практике, особенно когда теория возмущений не работает, проще использовать *не зависящую от времени* формулировку проблемы. Пусть имеется первоначальный пучок со *стационарной плотностью потока* частиц j_i (число частиц, проходящих через единицу площади в единицу времени). Экспериментальный детектор регистрирует определенное количество событий, соответствующих конечному состоянию $|f\rangle$, со скоростью \dot{W}_{fi} (количество событий в единицу времени). Отношение

$$\sigma_{fi} = \frac{\dot{W}_{fi}}{j_i} \quad (7.1)$$

измеряет вероятность рассматриваемого процесса $i \rightarrow f$ для одной падающей частицы. Имея размерность площади, эта характеристика называется эффективным *сечением*. В качестве основных наблюдаемых в экспериментах по рассеянию, сечения характеризуют элементарные акты взаимодействия не зависящие от интенсивности пучка.

7.2 Сечение классического рассеяния

Напомним, упругие рассеяния в классической механике [20], § 18. В парном столкновении мы всегда используем систему центра масс, где сталкивающиеся частицы сближаются друг с другом и после взаимодействия, расходятся под углом θ по отношению к первоначальному направлению.

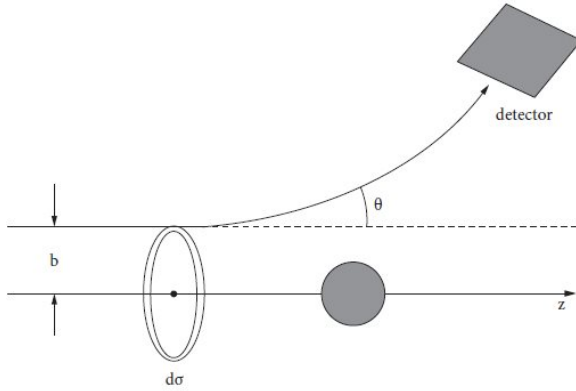


Рис. 7.1. Поперечное сечение и прицельный параметр.

Классически, угол рассеяния $\theta = \theta(b)$ определяется *прицельным параметром* b , что связано с орбитальным моментом ℓ как $\hbar\ell = m v b$, где v относительная скорость вдали от рассеивателя и m -приведенная масса снаряда и частицы мишени. Все частицы падающей волны, летящие в кольце между b и $b + db$, рис. 7.1, будут отклоняться на угол между θ и $\theta + d\theta$. Поэтому, *эффективное дифференциальное сечение* есть площадь кольца,

$$d\sigma = 2\pi b db = 2\pi b \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\theta; \quad (7.2)$$

символ абсолютного значения вставлен для того, чтобы всегда иметь положительное сечение. Конкретные свойства потенциалов скрыты в зависимости $\theta(b)$. *Полное сечение* даётся интегрированием дифференциального сечения по всем прицельным параметрам, или, что то же самое, по телесному углу рассеянных частиц. Поперечное сечение зависит от характера взаимодействия между снарядом и мишенью и от энергии E относительного движения.

Задача 7.1

Найти классические дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния точечной частицы массы m и кинетической энергии E на сферически-симметричной потенциальной яме радиуса R и глубины U_0 .

Решение Начальное состояние определяется прицельным параметром b и скоростью $v = \sqrt{2E/m}$. Классическая рассеяние возможно только для

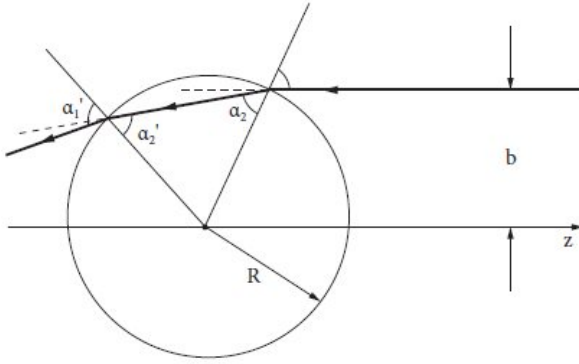


Рис. 7.2. Геометрия рассеяния частицы на сферической потенциальной яме.

$b < R$. Таким образом, *полное* сечение равно площади сечения перпендикулярного траектории частицы, т.е. площади геометрического сечения мишени,

$$\sigma = 2\pi \int_0^R b db = \pi R^2. \quad (7.3)$$

То же самое справедливо и для непроницаемой сферы (полное отражение частицы).

На границе области мы имеем скачок потенциала от нуля до отрицательного значения $-U_0$. Только нормальная составляющая скорости частиц будет меняться (нет тангенциальной силы). Траектории, следовательно, будут *преломляться* на поверхности. Пусть α_1 и α_2 есть угол падения и угол преломления, соответственно, рис. 7.2. Тогда наружная, v , и внутренняя, v' , скорости связаны *законом Снелла*,

$$v \sin \alpha_1 = v' \sin \alpha_2. \quad (7.4)$$

Угол падения определяется прицельным параметром,

$$\sin \alpha_1 = \frac{b}{R}. \quad (7.5)$$

Энергия частицы сохраняется,

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{mv'^2}{2} - U_0, \quad (7.6)$$

внутри ямы частица движется быстрее, поэтому $\alpha_2 < \alpha_1$,

$$\frac{\sin \alpha_2}{\sin \alpha_1} = \frac{v}{v'} = \sqrt{\frac{E}{E + U_0}} \quad (7.7)$$

(обратная величина играет роль *показателя преломления*). Угол отклонения $\alpha_2 - \alpha_1$ удваивается в точке выхода, так что суммарный угол рассеяния $\theta = 2(\alpha_2 - \alpha_1)$. Совместно с уравнением (7.7) это даёт

$$\cos \frac{\theta}{2} - \cot \alpha_1 \sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{E}{E + U_0}}. \quad (7.8)$$

Исключая α_1 с помощью уравнения (7.5) находим связь между прицельным параметром и углом рассеяния,

$$b^2 = R^2 \frac{(E + U_0) \sin^2(\theta/2)}{2E + U_0 - 2\sqrt{E(E + U_0)} \cos(\theta/2)}. \quad (7.9)$$

Для *центрального* столкновения $b = 0$, угол рассеяния $\theta = 0$, в то время как касательное столкновение, $b \rightarrow R$, приводит к максимальному углу рассеяния θ_m ,

$$\cos \frac{\theta_m}{2} = \sqrt{\frac{E}{E + U_0}}. \quad (7.10)$$

Дифференциальное сечение получается, в соответствии с определением (7.2), беря производную от уравнения (7.9). Результат может быть представлен как

$$d\sigma = \frac{\pi R^2}{2c} \frac{(c - c_m)(1 - cc_m)}{1 + c_m^2 - 2cc_m} d\theta, \quad (7.11)$$

где

$$c \equiv \cos \frac{\theta}{2}, \quad c_m \equiv \cos \frac{\theta_m}{2}. \quad (7.12)$$

Можно проверить, что в согласии с (7.3),

$$\sigma = \int_0^{\theta_m} \sin \theta d\theta \frac{d\sigma}{d\theta} = \pi R^2. \quad (7.13)$$

В пределе очень высоких энергий, $E \gg U_0$, конус (7.10) сужается, и рассеяние происходит по существу в направлении вперед. Здесь показатель

преломления близок к 1, а препятствие не меняет траектории. При малой энергии, показатель преломления очень большой, рассеяние становится все более и более изотропно, $\theta_m \rightarrow \pi$.

С учетом квазиклассического квантования орбитального момента, можно ввести *парциальное* сечение для данного ℓ , рис. 7.1,

$$\sigma_\ell = \pi(b_{\ell+1}^2 - b_\ell^2) = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) \quad (7.14)$$

Прицельный параметр ℓ -той парциальной волны в ℓ раз больше, чем длина волны $\lambda \sim 1/k$; здесь и ниже $k = mv/\hbar$ есть волновой вектор относительного движения. Таким образом, парциальное сечение (7.14) определяется длиной волны падающего пучка.

Наша цель заключается в разработке квантовой теории рассеяния и нахождения связи эмпирических сечений с основными характеристиками взаимодействия. Классическая картина будет являться частным случаем общей теории.

7.3 Матрица рассеяния

Картина рис. 7.1 подразумевает *стационарную* постановку рассеяния с постоянным падающим пучком поставляющим новые частицы. Другой подход рассматривает *временную эволюцию* начального квантового состояния, которое принадлежит энергетическому спектру в континууме. Состояние было приготовлено в далёком прошлом, $t \rightarrow -\infty$, достаточно давно, чтобы определить её энергию E_i с хорошей точностью. Состояние $|i\rangle \equiv |i; -\infty\rangle$, как правило, волновой пакет, который удовлетворяет уравнению Шрёдингера с гамильтонианом \hat{H}_0 *невзаимодействующих* частиц. Будучи так приготовленным, волновой пакет движется к *области взаимодействия* с мишенью (мы предполагаем *конечный* радиус взаимодействия). Взаимодействие описывается динамическим уравнением с *полным* гамильтонианом \hat{H} системы "снаряд + мишень". Состояние $|i\rangle$ не является стационарным состоянием \hat{H} и может испытывать переходы, как в снаряде, так и в мишени. Различные возможные конечные состояния соответствуют различным *каналам* процесса. Развитие во времени управляется *оператором эволюции* $\hat{U}(t, t_0)$, который преобразует волновую функции заданную в момент времени t_0 в волновую функцию в момент времени t .

В нашем случае, состояние $|i; -\infty\rangle$ порождает

$$|i; t\rangle = \hat{U}(t, -\infty)|i; -\infty\rangle. \quad (7.15)$$

Покидая область взаимодействия состояние (7.15) несет в себе продукты процесса рассеяния (конечные свободные частицы), которые регистрируются детекторами в отдаленном будущем, $t \rightarrow \infty$. Соответствующий оператор полной эволюции называется *матрицей рассеяния*, или просто S -матрицей,

$$\hat{S} = \hat{U}(+\infty, -\infty). \quad (7.16)$$

Возможные конечные состояния $|f\rangle$ опять регулируются гамильтонианом \hat{H}_0 и могут быть представлены в виде суперпозиции стационарных состояний \hat{H}_0 с энергией E_f . Амплитуда вероятности нахождения некоторого конечного собственного состояния $|f\rangle$ в суперпозиции появившейся после взаимодействия есть, в соответствии с квантовыми правилами, проекция эволюционирующего состояния $|i; +\infty\rangle$ на состояние $|f\rangle$,

$$\langle f|i; +\infty\rangle = \langle f|\hat{S}|i; -\infty\rangle \equiv \langle f|\hat{S}|i\rangle \equiv S_{fi}. \quad (7.17)$$

Поэтому матричные элементы S -матрицы на самом деле есть амплитуды наблюдаемых процессов, так что, вероятность перехода $i \rightarrow f$ равна

$$W_{fi} = |S_{fi}|^2. \quad (7.18)$$

Поскольку динамика (7.15) соответствует невозмущенной квантовой эволюции, оператор $\hat{U}(t, t_0)$ для любого t и t_0 является *унитарным*. В частности, S -матрица, также, является унитарной,

$$\hat{S}\hat{S}^\dagger = \hat{S}^\dagger\hat{S} = 1. \quad (7.19)$$

Унитарность необходима для того, чтобы гарантировать учёт всех физических каналов процесса. Вставляя произвольный полный набор промежуточных состояний $|n\rangle$ в матричный элемент $\langle f|\dots|i\rangle$ уравнения. (7.19), получаем

$$\sum_n (S^\dagger)_{fn} S_{ni} = \sum_n S_{nf}^* S_{ni} = \delta_{fi}, \quad (7.20)$$

или, для $f = i$,

$$\sum_n |S_{ni}|^2 = \sum_n W_{ni} = 1, \quad (7.21)$$

что явно выражает *сохранение вероятности*.

Будучи определяемой лежащей в основе динамикой, S -матрица в некотором смысле величина более фундаментального характера, чем гамильтониан. S -матрица связывает наблюдаемые состояния и имеет смысл в теориях, которые не используют гамильтонов формализм. Единственным необходимым условием является возможность определения *асимптотических состояний* невзаимодействующих частиц.

7.4 Вероятность перехода в единицу времени

S -матрица знает все законы сохранения. Ее матричные элементы, как амплитуды реальных физических процессов, исчезают, если состояние $|f\rangle$ имеет значение интеграла движения, которое отличается от значения такого же интеграла в состоянии $|i\rangle$. Другими словами, S -матрица *диагональна* в квантовых числах коммутирующих сохраняющихся операторов. Здесь мы предполагаем, что и \hat{H}_0 и полный \hat{H} имеют общие законы сохранения.

С учетом сохранения энергии и отделения возможного процесса вообще без рассеяния, запишем S -матрицу через *матрицу перехода* \hat{T} взятую на энергетической поверхности,

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{fi}. \quad (7.22)$$

Во втором члене введена δ -функция, которая учитывает сохранение энергии в непрерывном спектре, описывающим асимптотические состояния. Теперь мы должны понять правильный способ вычисления её квадрата, который появляется в вероятности переходов (7.18),

$$W_{fi} = |2\pi T_{fi} \delta(E_f - E_i)|^2, \quad f \neq i. \quad (7.23)$$

Этот вопрос уже рассматривался в теории возмущений в разделе 2.1.

Точное сохранение энергии соответствует бесконечной длительности процесса. Резкая δ -функция возникает после предельного перехода,

$$2\pi\hbar \delta(E_f - E_i) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t/2}^{+t/2} dt' e^{(i/\hbar)(E_f - E_i)t'}. \quad (7.24)$$

Если выразить одну δ -функцию в (7.23) как интеграл (7.24), наличие второй δ -функции позволяет положить $E_f = E_i$ во всех членах, включая интеграл, который сводится затем к длительности процесса t . Таким образом, процессы с достаточно точным сохранением энергии при $t \rightarrow \infty$ (легко оценить, что почти все реальные эксперименты удовлетворяют этому условию), имеют полную вероятность (7.23) пропорциональную времени. Тогда мы получаем *вероятность перехода в единицу времени*,

$$\dot{w}_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W_{fi}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (7.25)$$

Можно показать, что стационарное и зависящее от времени описание в теории рассеяния эквивалентны [Gol1964]. Существуют математические тонкости, связанные с необходимостью рассматривать волновые пакеты

вместо идеализированных плоских волн. Мы не будем обсуждать здесь такие вопросы, почти всегда можно использовать плоские волны в качестве полного базиса для разложения реальных волновых пакетов непрерывного спектра.

Основное уравнение (7.25) называется *золотое правило* в связи с его особой важностью, хотя первоначальное *золотое правило Ферми*, раздел 2.1, было написано в подобной форме только для случая, когда матрица перехода T_{fi} находится в *теории возмущений*. Покажем теперь, как этот пертурбативный подход следует из общих рамок.

7.5 Борновское приближение

Согласно идеологии предыдущего раздела мы разделяем полный гамильтониан H на части, соответствующие свободному движению невзаимодействующих частиц, \hat{H}_0 и взаимодействие, \hat{H}' ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \quad (7.26)$$

Обе части предполагаются не зависящими от времени, хотя мы можем рассматривать рассеяние как процесс, происходящий во времени. Невозмущенный гамильтониан \hat{H}_0 формирует асимптотические стационарные состояния $|n, t\rangle$ с определёнными энергиями E_n , конечно, с экспериментальными неопределённостями δE . В пределе малой неопределённости временная эволюция тривиальна,

$$|n; t\rangle = e^{-(i/\hbar)E_n t} |n\rangle, \quad (7.27)$$

где вектор состояния $|n\rangle$ не зависит от времени. Взаимодействие \hat{H}' несет ответственность за переходы между невозмущенными состояниями (7.27). Если вероятности переходов малы и всё рассеяние можно считать слабым возмущением, мы можем сделать соответствующие упрощения, используя разложение в ряд Тейлора по отношению к эффектам взаимодействия.

Полное уравнение Шрёдингера со взаимодействием есть

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}') |\Psi(t)\rangle. \quad (7.28)$$

Решается это уравнение переходом к *представлению взаимодействия* выделяя явную временную зависимость (7.27), порожденную невозмущенным гамильтонианом, оставшаяся часть все еще зависит от времени в присутствии возмущения:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t} |\Phi(t)\rangle. \quad (7.29)$$

В отсутствие возмущения $|\Phi\rangle$ была бы не зависящей от времени волновой функцией свободного движения, аналогично $|n\rangle$ в уравнении (7.27). В бесконечном прошлом мы стартуем с начального состояния $|i\rangle$ свободного движения, так что граничное условие к уравнению (7.29) есть

$$\underline{t \rightarrow -\infty}: \quad |\Phi(t)\rangle \rightarrow |\Phi(-\infty)\rangle = |i\rangle. \quad (7.30)$$

$|\Phi(t)\rangle$ называется волновой функцией в представлении взаимодействия.

Подставляя (7.29) в (7.28) мы видим, что вся временная зависимость в $|\Phi(t)\rangle$ обязана взаимодействию \hat{H}' ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = \hat{H}'_{\text{int}}(t) |\Phi(t)\rangle, \quad (7.31)$$

где гамильтониан \hat{H}' преобразован в представление взаимодействия согласно общим правилам преобразования операторов при унитарном преобразовании состояний (7.29),

$$\hat{H}'_{\text{int}}(t) = e^{(i/\hbar)\hat{H}_0 t} \hat{H}' e^{-(i/\hbar)\hat{H}_0 t}. \quad (7.32)$$

Теперь возмущение явно зависит от времени.

Новое уравнение (7.31) позволяет определить оператор эволюции $\hat{U}(t, t_0)$, где в нашем случае $t_0 \rightarrow -\infty$. Имея в виду начальное условие (7.30), ищем решение уравнения (7.31) в виде

$$|\Phi(t)\rangle = \hat{U}(t, -\infty) |i\rangle. \quad (7.33)$$

Как следует из (7.30) и (7.31), оператор эволюции должен удовлетворять операторному уравнению движения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}'_{\text{int}}(t) \hat{U}(t, t_0) \quad (7.34)$$

вместе с очевидным начальным условием, справедливым для любого t_0 ,

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1. \quad (7.35)$$

Из уравнений (7.34) и (7.35) можно получить интегральное уравнение

$$\hat{U}(t, -\infty) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \hat{H}'_{\text{int}}(t') \hat{U}(t', -\infty). \quad (7.36)$$

Уравнение (7.36) эквивалентно первоначальному уравнению Шрёдингера (7.28) плюс начальное условие. Но его удобнее использовать для решения

итерациями, которые соответствуют упоминавшемуся выше тэйлоровскому разложению. Здесь мы рассмотрим низший порядок, так называемое первое борновское приближение.

Предполагая, что эффекты взаимодействия являются в некотором смысле слабыми (позднее мы уточним это утверждение), мы можем заменить оператор \hat{U} в подинтегральном выражении на его невозмущённое значение 1. Переходя затем к пределу $t \rightarrow +\infty$ мы получаем явное выражение для S -матрицы (7.16) в первом порядке,

$$\hat{S} \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \hat{H}_{\text{int}}(t'). \quad (7.37)$$

Беря матричный элемент $\langle f | \hat{S} | i \rangle$ S -матрицы (7.37) между невозмущёнными состояниями, $f \neq i$, которые являются собственными состояниями \hat{H}_0 с собственными значениями соответственно E_f и E_i , и используя выражение (7.32) для $\hat{H}'_{\text{int}}(t)$, получаем

$$S_{fi} = -\frac{i}{\hbar} H'_{fi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{(i/\hbar)(E_f - E_i)t} = -2\pi i H'_{fi} \delta(E_f - E_i). \quad (7.38)$$

Сохранение энергии возникает, как и в (7.24), в результате предельного перехода к бесконечной длительности процесса. Сравнение с точным выражением (7.22) показывает, что амплитуда перехода T_{fi} в первом борновском приближении даётся просто недиагональным матричным элементом гамильтониана взаимодействия H' . Наконец, золотое правило (7.25) даёт вероятность перехода в единицу времени в борновском приближении,

$$\dot{w}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (7.39)$$

которое совпадает с золотым правилом (2.6). С правильной *плотностью конечных состояний* раздела 2.3, мы получаем дифференциальное сечение, совпадающее с (3.6).

В первом борновском приближении возмущение действует только один раз (*однократный процесс*). Амплитуда (7.37) интегрируется по всем возможным временам взаимодействия и вероятность (7.18) полностью учитывает интерференцию взаимодействий, которые происходят в разные моменты времени. Следующие итерации уравнения (7.36) отвечают вкладам *многократного рассеяния*. Можно найти формальное точное решение полного интегрального уравнения (7.36), но в большинстве случаев оно бесполезно. Простые задачи рассеяния одной частицы на внешнем потенциале могут быть решены численно, в то время как многочастичные задачи

в любом случае требуют дополнительных физических приближений. Часто уже борновское приближение даёт разумную качественную и даже количественную картину.

7.6 Уравнение непрерывности

Элементы S -матрицы и сечение могут быть рассчитаны в важном случае *потенциального рассеяния* описываемого уравнением Шрёдингера с фиксированной энергией, $E = \varepsilon$,

$$\left\{ \nabla^2 + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}. \quad (7.40)$$

Здесь мишень моделируется фиксированным потенциалом $U(\mathbf{r})$ без внутренних степеней свободы. Такой подход позволяет нам разработать точные методы и найти соответствующие приближения для конкретных ситуаций. Фактически, некоторые результаты будут иметь гораздо более широкую область применимости на более сложные случаи в том числе на неупругие процессы.

На этой стадии мы будем интересоваться только *упругим* рассеянием детектируя рассеянную начальную частицу. Потенциал предполагается имеющим конечный радиус действия R , будучи в остальном достаточно произвольным (даже необязательно изотропным). Присутствие неупругих процессов, которые выводят частицу из упругого канала, иногда может быть учтено феноменологически введением *комплексного* эффективного потенциала $U(\mathbf{r})$.

Уравнение Шрёдингера с действительным потенциалом позволяет определить *сохраняющийся ток*, см. Т. 1, (7.55),

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi \right]. \quad (7.41)$$

Ток удовлетворяет *уравнению непрерывности*, см. Т.1, (2.11), которое для стационарного состояния с определённой энергией превращается в

$$\text{div } \mathbf{j} = 0. \quad (7.42)$$

Эффективный *комплексный* потенциал нарушает эрмитовость гамильтониана, сохранение вероятности и инвариантность относительно отражения времени. Даже в стационарном состоянии (постоянный падающий поток)

частицы "исчезают" уходя в неупругие каналы. Повторяя стандартные вычисления, мы находим

$$\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{2}{\hbar} |\psi(\mathbf{r})|^2 \operatorname{Im} U(\mathbf{r}). \quad (7.43)$$

Мнимая часть потенциала, $\operatorname{Im} U$, которую мы также предполагаем короткодействующей, должна быть отрицательной, чтобы описывать исчезновение частиц; противоположный знак отвечает рождению частиц.

В отсутствие неупругих процессов поток $\oint \mathbf{j} \cdot d\vec{\mathcal{A}}$ через бесконечно удалённую, замкнутую поверхность равен нулю. В присутствии неупругих процессов это уже не так, поток становится отрицательным. Его отношение к плотности падающего потока j_i даёт сечение *поглощения* (полное неупругое сечение или сечение реакции)

$$\sigma_{\text{inel}} = -\frac{1}{j_i} \oint \mathbf{j} \cdot d\vec{\mathcal{A}} = -\frac{1}{j_i} \int_V d^3r \operatorname{div} \mathbf{j}. \quad (7.44)$$

Полное сечение есть сумма упругой и неупругой части,

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{inel}}. \quad (7.45)$$

Обсудим теперь в деталях определение упругого сечения.

7.7 Упругое рассеяние

Удалённый источник формирует начальный поток частиц движущихся вдоль оси \mathbf{k} с энергией ε . Поток описывается плоской волной

$$\psi_i(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}, \quad (7.46)$$

где мы пользуемся нормировкой на единичную плотность. Нормировка с помощью большого объёма, которая могла бы быть удобной в борновском приближении, должна записываться так,

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}. \quad (7.47)$$

Детектор, расположенный далеко, на расстоянии $r \gg R$, где R есть характерный размер области взаимодействия, регистрирует упруго рассеянные частицы в телесном угле do в направлении $\mathbf{r} = r\mathbf{n}(\theta, \varphi)$. После взаимодействия частицы движутся свободно и, в упругом рассеянии, они

имеют волновой вектор \mathbf{k}' той же величины, что и \mathbf{k} , но направленный вдоль \mathbf{r} ,

$$\mathbf{k}' = k\mathbf{n} = k \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (7.48)$$

Неупругие каналы в этом случае не регистрируются, но учитываются глобально в терминах поглощения (7.44).

В асимптотической области больших r , волновая функция искажённая рассеивателем всё ещё является суперпозицией решений уравнения Шрёдингера для свободного движения. Она может отличаться от начальной волны только на *расходящуюся сферическую волну* $\sim \exp(ikr)/r$ где знаменатель r возникает из-за распределения тока по большой поверхности, как это обсуждалось в главе (разделе) 17. Амплитуда расходящейся волны может зависеть от угла рассеяния θ между \mathbf{k}' и \mathbf{k} . Таким образом, *асимптотический вид* волновой функции может быть записан как

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (7.49)$$

где $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ есть *амплитуда рассеяния*, имеющая размерность длины. Граничное условие (7.49) иногда называют *условием излучения Зоммерфельда*.

Для начальной волны с нормировкой (7.46), ток, обсуждавшийся в разделе 7.6, равен $\mathbf{j}_i = \hbar \mathbf{k}/m = \mathbf{v}$, как это и должно быть для $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ с единичной плотностью ρ . Уходящий поток определяется рассеянной волной в (7.49). Радиальная компонента тока (7.41) равна

$$j_{\text{scatt}} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[f^* \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(f \frac{e^{ikr}}{r} \right) \right] = \frac{v}{r^2} |f|^2; \quad (7.50)$$

угловые компоненты тока убывают быстрее, чем $\sim 1/r^2$. В данный момент мы не интересуемся интерференцией между падающей и рассеянной волнами. Интерференцию возможно наблюдать только при положении детектора почти точно в направлении \mathbf{k} , внутри исчезающе малого угла $\theta_d \simeq \lambda/d$ где d есть ширина коллиматора формирующего пучок. θ_d это дифракционный угол волны дифрагировавшей на границах коллиматора. Для $\theta > \theta_d$ можно пренебречь интерференционной частью асимптотического тока. Интерференция в области взаимодействия, $r < R$, полностью учтена в амплитуде рассеяния f .

Выражение для сечения немедленно следует из тех же аргументов, что и при выводе (3.5). Детектор с площадью $d\mathcal{A} = r^2 d\Omega$ на расстоянии r будет регистрировать

$$dN = j_{\text{scatt}} d\mathcal{A} = j_{\text{scatt}} r^2 d\Omega = v |f|^2 d\Omega \quad (7.51)$$

частиц в секунду. Отношение скорости счёта к плотности падающего потока определяет дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{do} = \frac{dN}{j_i do} = |f|^2. \quad (7.52)$$

Этот результат не зависит от нормировки волновой функции.

7.8 Унитарность и оптическая теорема

Унитарность S -матрицы (7.19), непосредственно связанная с сохранением тока, налагает важные ограничения на амплитуду рассеяния. Рассмотрим более внимательно асимптотику волновой функции (7.49).

Плоская волна в асимптотике выглядит как суперпозиция (I.17.109) уходящей волны в направлении \mathbf{k} и падающей волны в направлении $-\mathbf{k}$,

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \approx \frac{2\pi}{ikr} \left[e^{ikr} \delta(\mathbf{n}_{\mathbf{k}} - \mathbf{n}) - e^{-ikr} \delta(\mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n}) \right]. \quad (7.53)$$

Вычислим опять ток вероятности (7.41), но теперь с учётом интерференционной части. Последняя была несущественна для вычисления сечения, за исключением исчезающе малых углов, но в сохранении вероятностей она играет важную роль. Как и раньше, на больших расстояниях мы должны дифференцировать только экспоненты. Прямое вычисление с волновой функцией (7.49) даёт

$$\mathbf{j} = v \left\{ \mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n} \frac{|f|^2}{r^2} + \frac{\mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n}}{2r} \left(f e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})+ikr} + f^* e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-ikr} \right) \right\}. \quad (7.54)$$

В уравнениях (7.53) и (7.54), как и ранее, $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ и \mathbf{n} это единичные вектора вдоль \mathbf{k} и \mathbf{r} [или \mathbf{k}' , см. уравнение (7.48)], соответственно.

В (7.54) мы имеем падающий и рассеянный потоки и их интерференцию. Подставляя в интерференционный член асимптотики (7.53) плоских волн и замечая, что из-за вектора $\mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n}$, члены с $\delta(\mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n})$ не дают вклада [напоминаем, что $x\delta(x) = 0$], мы приходим к току следующего вида,

$$\mathbf{j} = v \left\{ \mathbf{n}_{\mathbf{k}} + \mathbf{n} \frac{|f|^2}{r^2} - \mathbf{n} \frac{4\pi}{kr^2} \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}_{\mathbf{k}}) \operatorname{Im} f(0) \right\}. \quad (7.55)$$

Как уже упоминалось, интерференция возможна только в направлении вперёд, $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\mathbf{k}}$; соответствующая упругая амплитуда есть $f(0) \equiv f(\mathbf{k}, \mathbf{k})$.

Окружим область взаимодействия большой сферой ($r \rightarrow \infty$) и вычислим полный поток через эту сферу. Начальная волна проходит сквозь сферу

без изменений, так что полный поток от неё равен нулю. Рассеянный поток и интерференционный член дают

$$\oint d\vec{A} \cdot \mathbf{j} = v \int d\Omega r^2 \frac{|f|^2}{r^2} - v \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (7.56)$$

Интеграл в правой части уравнения (7.56) есть упругое сечение проинтегрированное по всем углам,

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d\Omega |f|^2. \quad (7.57)$$

Интеграл по бесконечно большой сфере в левой части (7.56) может быть отличен от нуля только при наличии неупругих процессов и ток "утекает" из упругого канала демонстрируя явное нарушение уравнения непрерывности. Этот интеграл определяет сечение поглощения (7.44).

Возвращаясь к уравнению (7.56), мы получаем [сравните уравнения (30.45,93) для рассеяния света] *оптическую теорему*, которая связывает мнимую часть *упругой* амплитуда рассеяния вперёд с *полным* сечением всех процессов, упругих и неупругих,

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{inel}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0). \quad (7.58)$$

Фактически, эта теорема говорит только о сохранении полного числа частиц. Исчезновение частиц из начального пучка возникает из-за интерференции падающего потока с потоком рассеянным в направлении вперёд. Эти частицы вновь появляются в упругом и неупругих каналах.

Задача 7.2

Показать, что для чисто упругого рассеяния (нет поглощения) оптическая теорема (7.58) есть частный случай с $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}}$ *упругого условия унитарности*,

$$\frac{1}{2i} \left[f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right] = \frac{k}{4\pi} \int d\Omega'' f^*(\mathbf{k}'', \mathbf{k}') f(\mathbf{k}'', \mathbf{k}), \quad (7.59)$$

где интегрирование идёт по углам вектора $\mathbf{k}'' = k\mathbf{n}''$ имеющего ту же величину, что и \mathbf{k} и \mathbf{k}' .

Решение Вывод делается непосредственно из уравнения Шрёдингера: запишите уравнение Шрёдингера для волновых функций $\psi_{\mathbf{k}}$ и $\psi_{\mathbf{k}}^*$, с волновыми векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}' равной длины; умножьте уравнения на $\psi_{\mathbf{k}'}^*$ и

$\psi_{\mathbf{k}}$, соответственно, вычтите одно из другого и проинтегрируйте по большому объёму, используя асимптотики (7.49) и разложение плоской волны (7.53). При $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, уравнение (7.59) даёт снова оптическую теорему (7.58) с $\sigma_{\text{inel}} = 0$.

Рассмотрим $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ как матричный элемент $\langle \mathbf{k}' | \hat{f} | \mathbf{k} \rangle$ оператора \hat{f} , определённого на энергетической поверхности $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$, который преобразует начальную падающую волну в упруго рассеянную согласно правилу

$$\hat{f}\psi_{\mathbf{k}} = \int \frac{d\mathbf{n}'}{4\pi} \langle \mathbf{k}' | \hat{f} | \mathbf{k} \rangle \psi_{\mathbf{k}'}. \quad (7.60)$$

Тогда условие упругой унитарности (7.59) можно записать в операторном виде

$$\hat{f} - \hat{f}^\dagger = 2ik\hat{f}^\dagger\hat{f}. \quad (7.61)$$

По физическому смыслу, амплитуда рассеяния f на энергетической поверхности эквивалентна общему оператору рассеяния T в уравнении (7.22). Их нормировка немного различна, $T \leftrightarrow -2kf$. Вводя для S -матрицу как оператор на энергетической поверхности,

$$\hat{S} = 1 + 2ik\hat{f}, \quad (7.62)$$

мы видим, что уравнение (7.61) эквивалентно условию унитарности (7.19).

7.9 Функция Грина

По видимому, наиболее общим подходом в теории рассеяния является метод *функций Грина*. Будучи в принципе точным, он позволяет делать множество приближений, в зависимости от конкретных физических ситуаций. Кроме того, он непосредственно обобщается на не потенциальные задачи.

Нам нужно решить уравнение Шрёдингера с граничным условием излучения (7.49) в асимптотической области. Будем искать решение в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} + \psi'(\mathbf{r}), \quad (7.63)$$

где рассеянная волна $\psi'(\mathbf{r})$ ведёт себя на больших расстояниях как $f \exp(ikr)/r$. Плоская волна удовлетворяет уравнению

$$(\nabla^2 + k^2) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} = 0, \quad (7.64)$$

так что второй член в (7.63) должен быть решением *неоднородного* уравнения

$$(\nabla^2 + k^2)\psi'(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (7.65)$$

с полной функцией ψ , уравнения (7.63), в правой части.

Функция Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ определяется как решение свободного волнового уравнения (по отношению к координате \mathbf{r}) индуцированное единичным источником расположенным в точке \mathbf{r}' ,

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7.66)$$

Это уравнение не определяет однозначно функцию Грина. Действительно, всегда можно получить другое решение (7.66) прибавляя решение *однородного* уравнения (7.64) с произвольным коэффициентом. Функция Грина должна быть доопределена граничным условием. В нашей задаче мы требуем, чтобы в асимптотике была *расходящаяся волна*,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto \frac{e^{ikr}}{r}, \quad r \gg r'. \quad (7.67)$$

В этом случае принцип суперпозиции даёт формальное решение уравнения Шрёдингера (7.65) в виде

$$\psi'(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (7.68)$$

Конечно, это всё ещё интегральное уравнение, *уравнение Липпмана-Швингера*. Под интегралом стоит неизвестная функция ψ . Уравнение (7.68) удобно тем, что оно объединяет первоначальное уравнение Шрёдингера с граничным условием для ψ' , которое выполняется благодаря тому, что функция Грина в (7.68) удовлетворяет уравнению (7.67).

Вспоминая решение уравнения Пуассона для точечного заряда,

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (7.69)$$

легко видеть, что решение уравнения (7.66) с желаемой асимптотикой (7.67) есть

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (7.70)$$

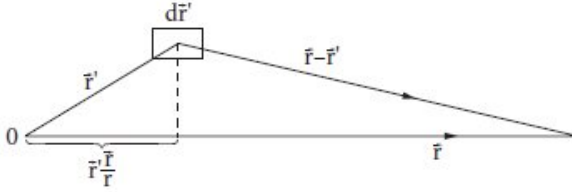


Рис. 7.3. Геометрический смысл разложения (7.71).

Оператор $\nabla^2 + k^2$ действующий на (7.70) даёт ноль везде, за исключением сингулярной точки $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, где он даёт δ -функцию, как в (7.69). Граничное условие (7.67) также выполняется.

При $r \gg r'$ мы имеем, Fig. 7.3,

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2r(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}) + r'^2} \approx r - (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (7.71)$$

Поэтому показатель экспоненты в (7.70) приближённо равен $kr - k(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}') = kr - (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')$ с обычным определением (7.48) вектора \mathbf{k}' . Для асимптотического поведения мы получаем,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (7.72)$$

что мы и хотели: расходящуюся сферическую волну (7.67) умноженную на амплитуду, которая зависит только от ориентации рассеянного волнового вектора \mathbf{k}' по отношению к вектору \mathbf{r}' некоторой точки в области взаимодействия; эта область в подынтегральном выражении (7.68) определяется потенциалом $U(\mathbf{r}')$.

Таким образом, мы приходим к интегральному уравнению, которое следует из (7.63, 7.68) и (7.70),

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (7.73)$$

Так же, как в обсуждении факторов в разделе 3.3, это уравнение выражает *принцип суперпозиции*. Волновая функция в точке \mathbf{r} формируется первичной плоской волной, приходящей сюда без всякого взаимодействия и вторичными сферическими волнами излучёнными из точек \mathbf{r}' где существует ненулевой потенциал. Вклад каждой внутренней точки \mathbf{r}' пропорционален потенциалу $U(\mathbf{r}')$ и *полной амплитуде* $\psi(\mathbf{r}')$ волновой функции

в этой точке. Это уравнение *самосогласованно*, в отличие от борновского приближения.

Беря в уравнении (7.73) точку \mathbf{r} далеко от области взаимодействия, $r \gg R$, и используя (7.72), мы получаем точное выражение для амплитуды рассеяния как коэффициент (7.49) перед расходящейся сферической волной e^{ikr}/r ,

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'), \quad (7.74)$$

где зависимость от \mathbf{k} скрыта в функции ψ в подинтегральном выражении.

Задача 7.3

- Для потенциала, который падает на больших расстояниях как $U(r) \propto r^{-s}$, найти какие значения s допускают асимптотическое решение в виде (7.74).
- Для потенциала, который становится пренебрежимо мал на расстояниях $r \sim R$, найти на каких расстояниях становится справедливым асимптотическое представление (7.49).

Решение

- Выражение для амплитуды рассеяния получено в предположении, что асимптотическую волновую функцию можно разложить на падающую и рассеянную волны. Уравнение (7.74) должно обеспечивать сходящийся результат для обоих членов разложения (7.49) для $\psi_{\mathbf{k}}$. Первый член даёт борновское приближение, которое содержит интеграл

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})} \frac{1}{r^s} = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr \frac{\sin(qr)}{r^{s-1}}. \quad (7.75)$$

Интеграл сходится при $s > 1$, в противном случае потенциал падает слишком медленно и нет области где падающая волна не была бы искажена; в частности, кулоновский случай не допускает строгого разложения волновой функции хотя формально вычисленное резерфордское сечение правильно (но фаза амплитуды рассеяния потеряна).

- С правильным выбором функции Грина (7.72), интегральное уравнение для рассеянной волновой функции принимает вид (7.73). В асимптотической области, $r \gg R$, где R - радиус действия потенциала, всегда можно пренебречь r' в знаменателе. Но, в числителе функции Грина важно понимать какую ошибку вносит такое приближение в фазу экспоненты.

Аккуратное разложение, включая члены второго порядка, даёт

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}') + r'^2} \approx r - \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')}{r} + \frac{1}{2r} \left[r'^2 - \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')^2}{r^2} \right]. \quad (7.76)$$

Чтобы можно было пренебречь членами второго порядка в показателе экспоненты, недостаточно иметь $r \gg R$; нужно чтобы $kR^2/r \ll 1$. В случае быстрых частиц, $kR \gg 1$, мы должны уходить на расстояния $r \gg kR^2 \sim R(kR) \gg R$. Только на таких больших расстояниях функция приобретает асимптотический вид. Оптический аналог этого хорошо известен [11], § 61.

7.10 Борновский ряд

Простейшей попыткой решения интегрального уравнения (7.73) является решение *итерациями*. Подставим полное выражение (7.73) в последний член. Это даёт

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')} \\ &+ \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^3r' d^3r'' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi(\mathbf{r}''). \end{aligned} \quad (7.77)$$

Эта процедура может быть продолжена давая бесконечный *борновский ряд* (в теории интегральных уравнений он называется *рядом Неймана*)

Мы начинаем с плоской волны (нет рассеяния). Следующий член содержит эффект *однократного* рассеяния падающей волны в точке \mathbf{r}' и последующего свободного распространения до точки наблюдения \mathbf{r} . Интеграл по всем точкам взаимодействия \mathbf{r}' учитывает квантовую интерференцию всех возможных амплитуд. Свободное движение $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ от "источника" в точке \mathbf{r}' описывается функцией Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, которая по этой причине называется *пропагатором* свободных частиц. Третий член борновского ряда описывает *двукратное* рассеяние с распространением между рассеяниями и после них, и т.д. Структура всего ряда регулярна и соответствует картине *многократного* рассеяния. Будучи просто аналитическим выражением принципа суперпозиции, этот ряд близко связан с *формулировкой Фейнмана квантовой механики* как функционального интеграла по всем возможным путям, см. раздел I.7.11.

Борновский ряд может быть изображён *диаграммами*, Fig. 7.4, которые позволяют немедленно написать аналитическое выражение для члена произвольно высокого порядка. Поскольку графическое выражение справа от

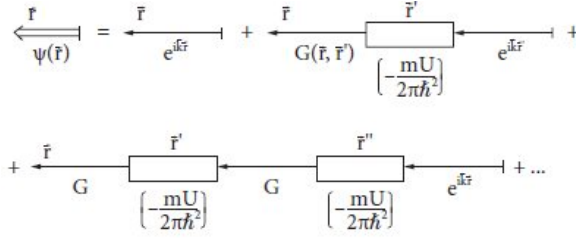


Рис. 7.4. Борновский ряд в диаграммах.

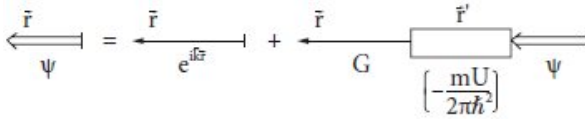


Рис. 7.5. Интегральное уравнение для волновой функции рассеяния.

первой функции Грина G и первой вершины взаимодействия U является тем же самым бесконечным рядом, мы можем записать символическое уравнение, Fig. 7.5, которое есть не что иное как первоначальное уравнение (7.73).

Точное аналитическое решение интегрального уравнения (7.73) или суммирование всего ряда обычно невозможно. Более того, даже численное решение встречает серьёзные трудности если потенциал не имеет симметрии и переменные не разделяются. Однако, сама структура ряда открывает пути для различных приближённых методов.

Простейшее приближение заключается в обрывании ряда на каком то шаге. Это можно формально обосновать, если потенциал слабый, поскольку каждый следующий шаг даёт дополнительную степень U . Первое борновское приближение учитывает только однократные процессы,

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')} . \quad (7.78)$$

Из (7.78) и (7.72) мы находим амплитуду рассеяния в борновском приближении,

$$f_B(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}')} U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')} \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} U_{\mathbf{q}}, \quad (7.79)$$

где мы ввели фурье-компоненту потенциала $U_{\mathbf{q}}$ для переданного импульса \mathbf{q} , уравнения (3.14).

Дифференциальное сечение в этом приближении,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |U_{\mathbf{q}}|^2, \quad (7.80)$$

совпадает с тем, что было найдено в теории возмущений (упругий предел в уравнении (3.12)). В этом порядке вся зависимость от энергии и угла рассеяния проявляется только через передаваемый импульс \mathbf{q} . Для изотропного потенциала $U(r)$, интегрирование по углам \mathbf{r}' в (7.79) (беря \mathbf{q} за полярную ось) даёт

$$f_B(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr \frac{\sin(qr)}{qr} r^2 U(r). \quad (7.81)$$

Задача 7.4

Для произвольного центрального потенциала $U(r)$ показать, что если борновское приближение справедливо, произведение $E\sigma(E)$, где $\sigma(E)$ есть полное сечение рассеяния при энергии E , является монотонно растущей функцией E .

Решение Это немедленно следует из борновского приближения для сечения,

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi \sin\theta d\theta |f(q)|^2, \quad (7.82)$$

преобразованного с помощью подстановки

$$\mu = q^2, \quad d\mu = 2k^2 \sin\theta d\theta, \quad (7.83)$$

как

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{4k^2} d\mu |f|^2 = \frac{\pi\hbar^2}{2mE} \int_0^{8mE/\hbar^2} d\mu |f|^2, \quad (7.84)$$

отсюда следует, что $E\sigma(E)$ есть возрастающая функция энергии.

7.11 Применимость борновского приближения

Обрывание борновского ряда может быть обосновано, если отброшенные члены малы по сравнению с удержанными. Каждый следующий член даёт дополнительный интеграл от произведения потенциала и пропагатора.

Условие малости n -го члена по сравнению с $n - 1$ -ым может быть записано как

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')} \right| \ll |e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}| = 1. \quad (7.85)$$

Наиболее опасной областью для нарушения условия (7.85) является область малых r . Предполагая гладкость потенциала и отсутствие существенных сингулярностей получаем для $r = 0$ и *низких энергий*, $kR \ll 1$,

$$\left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{U(\mathbf{r}')}{r'} \right| \sim 4\pi \frac{mR^2}{4\pi\hbar^2} |\bar{U}| \sim \frac{|\bar{U}|}{\bar{K}} \ll 1, \quad (7.86)$$

где мы ввели среднее значение потенциала \bar{U} . Это значит, что средняя потенциальная энергия \bar{U} должна быть мала по сравнению со средней кинетической энергией $\bar{K} \sim \hbar^2/mR^2$ обязанной, из-за соотношения неопределённостей, локализации частицы в области взаимодействия. Заметим, что этот параметр определяет *мелкую потенциальную яму*, см. раздел I.3.5.

Применимость борновского приближения улучшается при *высокой энергии*. Оно может быть справедливо, в смысле критерия (7.86), даже для сильного взаимодействия. При возрастании энергии волновая функция начинает быстро осциллировать внутри области интегрирования. Как и в обсуждении формфакторов в разделе 3.3, интеграл определяющий рассеянную волну в (7.73) становится мал из-за сокращения вкладов от различных частей области интегрирования $r' < R$. Для $r = 0$ имеем из (7.85)

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| \int d^3r \frac{U(\mathbf{r})}{r} e^{i[kr+(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]} \right| \ll 1. \quad (7.87)$$

Рассматривая для простоты изотропный потенциал $U(r)$ и выполняя интегрирование по углам, как и в (7.81), получаем

$$\frac{m}{k\hbar^2} \left| \int_0^\infty dr U(r) (e^{2ikr} - 1) \right| \ll 1. \quad (7.88)$$

При низких энергиях, $e^{2ikr} - 1 \approx 2ikr$, и мы возвращаемся к оценке (7.86). Но при $kR \gg 1$, осциллирующий член e^{2ikr} даёт почти исчезающий вклад (гладкий потенциал не имеет таких высоких фурье-компонент). Тогда условие применимости борновского приближения становится намного слабее,

$$\frac{mR}{k\hbar^2} \bar{U} \sim \frac{\bar{U}}{\bar{K}} \frac{1}{kR} \ll 1. \quad (7.89)$$

Таким образом, точность борновского приближения возрастает при высоких энергиях (время взаимодействия мало, так что многократные процессы менее вероятны)

Для кулоновского потенциала, $U(r) = Ze^2/r$, нельзя ввести определённый радиус действия сил. Но, используя в (7.89) произвольный радиус R и оценивая \bar{U} как $U(R)$, мы получаем эффективный критерий слабости кулоновского взаимодействия в терминах параметра Зоммерфельда, см. (I.2.66),

$$\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v}. \quad (7.90)$$

Кулоновское взаимодействие может рассматриваться как возмущение, если

$$\frac{mR}{k\hbar^2} \frac{Ze^2}{R} = \frac{mZe^2}{k\hbar^2} = \eta \ll 1. \quad (7.91)$$

Задача 7.5

Вычислить в борновском приближении сечение рассеяния быстрой частицы на потенциале Юкавы, $U(r) = (g/r) \exp(-\mu r)$.

Решение Борновское приближение применимо если потенциал слабый, условие (7.86), или для быстрых частиц условие (7.89). Первое условие даёт $gm/\mu\hbar^2 \ll 1$, что совпадает с условием отсутствия связанных состояний, если потенциал притягивающий *задача I.1.8*. Условие для быстрых частиц, $g/\hbar v \ll 1$, похоже на аналогичное условие для кулоновского потенциала (7.91).

Амплитуда рассеяния может быть легко вычислена из (7.81). Дифференциальное сечение монотонно убывает с увеличением передаваемого импульса,

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 4 \left(\frac{gm}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(q^2 + \mu^2)^2}. \quad (7.92)$$

Для $\mu \rightarrow 0$, результат совпадает с Резерфордским сечением (3.25). Полное сечение получается интегрированием по углам. Оно расходится при $\mu \rightarrow 0$,

$$\sigma = 16\pi \left(\frac{gm}{\hbar^2\mu} \right)^2 \frac{1}{4k^2 + \mu^2}. \quad (7.93)$$

При низких энергиях, $kR \ll 1$, рассеяние в борновском приближении изотропно, как это уже обсуждалось в связи с формфакторами. При возрастании энергии в рассеянии появляется пик вперёд, внутри конуса $\theta \leq 1/kR$.

Качественно, такие свойства рассеяния присутствуют и в классической механике, *задача 7.1*. Но, следует отметить, что невозможно в борновском приближении получить точный результат для $\theta \rightarrow 0$. Борновская амплитуда $f(0)$ - действительна, что противоречит оптической теореме (7.58). Полное сечение, а следовательно и $\text{Im}f(0)$, являются величинами *второго порядка* по отношению к потенциалу. Такими вкладами мы пренебрегаем в низшем борновском приближении.

7.12 Рассеяние при высоких энергиях

Борновское приближение может быть подправлено так, чтобы выполнялась оптическая теорема и расширилась область его применимости. Единственное условие применимости этого *приближения прицельного параметра* или *приближения эйконала* заключается в том, что энергия должна быть велика по сравнению с потенциалом, $\bar{U}/E \ll 1$. Борновский параметр (7.89), $(\bar{U}/\bar{K})(1/kR) \sim (\bar{U}/E)(kR)$ может быть при этом большим.

При высоких энергиях в сечение рассеяния дают вклад много парциальных волн. Их интерференция приводит к выделению области вблизи классической траектории с прицельным параметром b , который определяется средним орбитальным моментом интерферирующих волн, $b \sim \bar{\ell}/k$. Траектория близка к прямой линии и ось пучка z определяет направление в котором волновая функция осциллирует наиболее быстро. Волновую функцию можно записать как

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{ikz} C(\mathbf{r}), \quad (7.94)$$

где амплитудная функция $C(\mathbf{r})$ меняется медленнее, чем экспонента e^{ikz} с большим k .

При подстановке волновой функции (7.94) в уравнение Шрёдингера мы можем пренебречь поперечными (x и y) производными, которые малы по сравнению с главным членом $\sim 2(\nabla e^{ikz}) \cdot (\nabla C)$, который содержит градиент вдоль траектории. В этом приближении для медленно меняющейся амплитуды мы получаем

$$2ik \frac{\partial C(\mathbf{r})}{\partial z} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) C(\mathbf{r}). \quad (7.95)$$

Пренебрегая поперечными производными мы не учитываем дифракционное уширение пучка, которое будет существенным на очень больших расстояниях, как в *дифракции Фраунгофера* от удалённого источника света [LL2, § 61]. Но, наша цель найти амплитуду рассеяния f , которая, согласно

точному выражению (7.74), определяется волновой функцией в области взаимодействия.

Решение уравнения (7.95) есть

$$C(\mathbf{r}) = e^{-(i/\hbar v) \int_{-\infty}^z dz U(\mathbf{r})}. \quad (7.96)$$

Интеграл в (7.96) определяет *эйконал*, изменение фазы вдоль прямой траектории параллельной оси z . Волновая функция в (7.96) взята в точке $\mathbf{r} = \sqrt{z^2 + \mathbf{b}^2}$, где \mathbf{b} - двумерный поперечный вектор. Здесь мы не предполагаем, что потенциальная фаза в (7.96) мала.

В классическом пределе, фаза φ волновой функции связана с *классическим действием* $A = \int p dq$ вдоль траектории, измеренной в единицах \hbar , $\varphi \leftrightarrow A/\hbar$. Изменение действия из-за присутствия рассеивающего потенциала равно

$$\frac{\Delta A}{\hbar} = \int dz \left(\sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U} - k \right). \quad (7.97)$$

При высоких энергиях, $E \gg U$, мы можем сделать разложение, выделив член линейный по потенциалу,

$$\frac{\Delta A}{\hbar} \approx -\frac{1}{\hbar v} \int dz U. \quad (7.98)$$

Это и есть сдвиг фазы в приближении эйконала (7.96).

Теперь мы используем эйкональное выражение,

$$U\psi = i\hbar v e^{ikz} \frac{\partial C}{\partial z}, \quad (7.99)$$

которое следует из уравнения (7.95), в определении (7.74) амплитуды рассеяния,

$$f = \frac{k}{2i\pi} \int d^3r \frac{\partial C}{\partial z} e^{ikz - i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}. \quad (7.100)$$

Показатель экспоненты равен

$$kz - (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) = (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r} = -(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (7.101)$$

со стандартным определением передаваемого импульса \mathbf{q} . Поскольку траектория близка к прямой линии и угол рассеяния мал, то \mathbf{q} перпендикулярен к \mathbf{k} . Поэтому $(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \approx (\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})$. Это позволяет проинтегрировать по z в (7.100),

$$f = \frac{k}{2i\pi} \int dz \frac{\partial C}{\partial z} \int d^2b e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})}. \quad (7.102)$$

Интеграл по z в (7.102) даёт разность $C(z = \infty)$ и $C(z = -\infty) = 1$. Полный фазовый интеграл (7.96) даёт квазиклассическое выражение для S -матрицы при заданной величине прицельного параметра \mathbf{b} ,

$$S(\mathbf{b}) = e^{2i\delta(\mathbf{b})}. \quad (7.103)$$

Это соответствует *фазе рассеяния*

$$\delta(\mathbf{b}) = -\frac{1}{2\hbar v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz U(\mathbf{b}, z) \quad (7.104)$$

в согласии с полуклассической интерпретацией (7.98).

Окончательно, амплитуда рассеяния (7.102) может быть записана как

$$f = \frac{k}{2i\pi} \int d^2b [S(\mathbf{b}) - 1] e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})}. \quad (7.105)$$

При достаточно высокой энергии, когда фаза рассеяния $\delta(\mathbf{b})$ мала, мы можем положить $S(\mathbf{b}) - 1 \approx 2i\delta(\mathbf{b})$. В этом случае, поперечный интеграл (7.105) объединяется с продольным интегралом в (7.104), так что амплитуда рассеяния совпадает с результатом борновского приближения (7.79). Иными словами, в эйкональном подходе сдвиг фазы вдоль траектории, вычисленный в борновском приближении уходит в показатель экспоненты.

Амплитуда рассеяния вперёд даётся (7.105) при $\mathbf{q} = 0$,

$$f(0) = \frac{k}{2i\pi} \int d^2b [S(\mathbf{b}) - 1]. \quad (7.106)$$

Это *комплексное* (в отличие от борновского приближения) выражение определяет, согласно оптической теореме (7.58), полное сечение

$$\sigma = 2 \int d^2b \operatorname{Re}[1 - S(\mathbf{b})]. \quad (7.107)$$

Тенденция современной физики —
разложить всю материальную
вселенную по волнам, и чтобы не было
ничего кроме волн.

Дж. Х. Джинс, *Таинственная
Вселенная*

Глава 8

Метод парциальных волн

8.1 Анализ парциальных волн

Если потенциал *изотропный*, $U(\mathbf{r}) = U(r)$, ситуация упрощается и мы можем полностью использовать инвариантность относительно поворотов и свойства углового момента. В центральном поле сохраняется орбитальный момент ℓ относительного движения и можно рассматривать рассеяние индивидуальных *парциальных волн* с определённым ℓ .

Каждая парциальная волна рассеивается независимо и S -матрица диагональна в ℓ -представлении. Элементами унитарной S -матрицы являются комплексные числа,

$$S_\ell = e^{2i\delta_\ell} \quad (8.1)$$

которые могут зависеть только от энергии $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ относительного движения. В отсутствие поглощения упругая унитарность требует, чтобы все собственные значения S находились на единичной окружности,

$$|S_\ell|^2 = 1 \quad (8.2)$$

так что все *фазы рассеяния* δ_ℓ действительны. Мы уже встречались с фазами рассеяния и обсуждали их происхождение в приближении высоких энергий, уравнения (7.103) и (7.104). Из физического смысла S -матрицы (7.16), как оператора эволюции начального состояния, можно понять, что упругое рассеяние приводит к появлению дополнительного сдвига фазы $2\delta_\ell$ парциальной волны при прохождении через область взаимодействия (разность между полной фазой и невозмущённой фазой свободного движения). Определение (8.1) напоминает классическую картинку траектории при отражении, *задача 7.1*: половина сдвига фазы δ_ℓ набирается до и столько же набирается после прохождения точки наибольшего сближения. Эта

полуклассическая картина полезна, когда в рассеянии участвуют много парциальных волн. Она может быть обобщена на потенциалы зависящие от спина и на наличие неупругих каналов.

Метод парциальных волн формулирует задачу рассеяния как задачу вычисления фазовых сдвигов (фаз рассеяния). Прежде всего, мы должны в подходящих терминах выразить наблюдаемые сечения рассеяния. Задача рассеяния для *бесспиновых* частиц и центрально-симметричного потенциала является *аксиально-симметричной*: только одно направление выделено экспериментальной постановкой - направление \mathbf{k} начального падающего пучка. Примем это направление за ось z . Угол рассеяния θ это полярный угол вектора \mathbf{k}' , уравнения (7.48). Благодаря аксиальной симметрии амплитуда рассеяния $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ не может зависеть от азимутального угла вектора \mathbf{k}' . Она зависит только от θ и энергии, которую мы не будем явно указывать.

Асимптотика волновой функции (7.49) принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{ikr \cos \theta} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (8.3)$$

Амплитуда рассеяния $f(\theta)$ может быть разложена по полиномам Лежандра, что в точности совпадает с разложением по парциальным волнам с определённым орбитальным моментом ℓ ,

$$f(\theta) = \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) f_{\ell}. \quad (8.4)$$

Задача 8.1

Показать, что сферические функции $Y_{\ell m}(\mathbf{n}_{\mathbf{k}})$ являются собственными функциями оператора \hat{f} , уравнения (7.60), и что парциальные амплитуды f_{ℓ} , уравнения (8.4), есть соответствующие собственные значения вырожденные по магнитному квантовому числу m .

Падающая плоская волна в (8.3) также может быть представлена как суперпозиция парциальных волн. Мы уже находили в (7.53) это разложение в асимптотической области,

$$e^{ikr \cos \theta} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) [e^{ikr} - (-)^{\ell} e^{-ikr}]. \quad (8.5)$$

Здесь мы использовали условие полноты для полиномов Лежандра, см. (I.16.146) и (I.16.148). Теперь мы собираем вместе входящую и уходящую волны и получаем

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \frac{i}{2kr} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) [(-)^{\ell} e^{-ikr} - (1 + 2ikf_{\ell}) e^{ikr}]. \quad (8.6)$$

Входящая компонента $\propto e^{-ikr}$ не меняется рассеянием. В противоположность этому, уходящая волна искажается. Её амплитуда не равна единице; она приобретает фактор

$$S_\ell = 1 + 2ikf_\ell. \quad (8.7)$$

Величины S_ℓ , в уравнении (8.7), есть просто элементы S -матрицы преобразующие падающую волну (точнее её уходящую часть) в рассеянную волну. Как мы уже обсуждали, для центрального поля S -матрица должна быть диагональной в ℓ -представлении. Амплитуда f , рассматриваемая как оператор (7.60), также диагонализуется в этом представлении и её матричными элементами являются парциальные амплитуды f_ℓ . Парциальные волны ψ_ℓ [отдельные члены в (8.6)] являются собственными функциями оператора \hat{f} с соответствующими собственными значениями f_ℓ . Выражение (8.7) в точности совпадает с условием унитарности (7.62).

Дифференциальное упругое сечение (7.52) есть произведение двух разложений, (8.4) и такого же для сопряжённой функции f^* . Оно не имеет простого вида поскольку все парциальные волны *интерферируют* на детекторе стоящим под определённым углом. Интерференция исчезает в *полном* сечении в силу ортогональности парциальных волн в интегралах по углам. Записывая амплитуду рассеяния (8.4) как

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) (S_{\ell} - 1), \quad (8.8)$$

мы получаем полное сечение в виде суммы *парциальных сечений*,

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{el}} &= \sum_{\ell\ell'} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) f_{\ell} f_{\ell'}^* \int d\theta P_{\ell}(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) \\ &= 4\pi \sum_{\ell} (2\ell + 1) |f_{\ell}|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) |S_{\ell} - 1|^2. \end{aligned} \quad (8.9)$$

8.2 Упругое и неупругое сечения

С той же асимптотической волновой функцией (8.6), мы можем вычислить теряющийся радиальный поток. Простая алгебра даёт сечение поглощения (7.44)

$$\sigma_{\text{inel}} = -\frac{1}{v} \int d\theta j_r r^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) (1 - |S_{\ell}|^2). \quad (8.10)$$

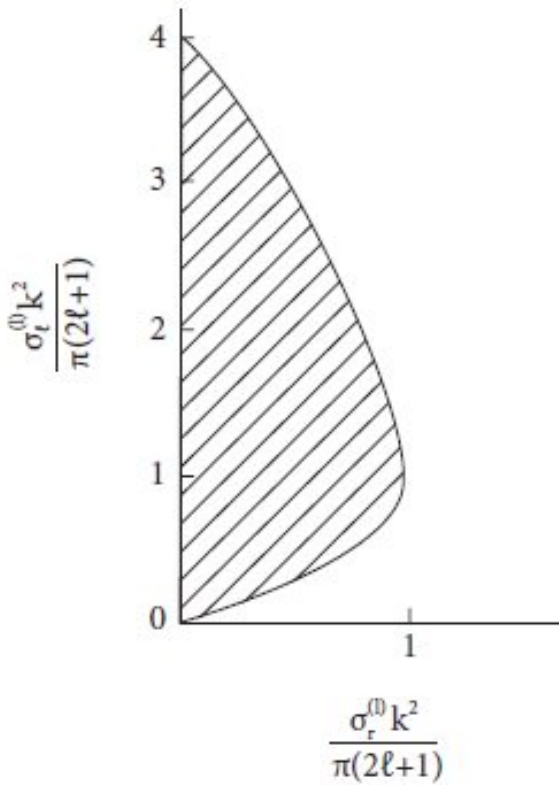


Рис. 8.1. Возможные пределы упругого сечения при заданном неупругом сечении. Значения внутри заштрихованной области доступны.

Таким образом, S -матрица определяет оба сечения, упругое и сечение поглощения. Поглощение здесь входит только суммарно, без выделения отдельных каналов. Оно отсутствует, если выполняется условие $|S_\ell|^2 = 1$, уравнение (8.2). В присутствии поглощения, $|S_\ell| < 1$, и фазы δ_ℓ становятся комплексными. Разложение по парциальным волнам имеет простую полуклассическую интерпретацию. В классической механике ℓ -тая парциальная волна соответствует частицам попадающим в площадь кольца между $b_{\ell+1}$ и b_ℓ , Fig. 7.1. Площадь умноженная на вероятность захвата $1 - |S_\ell|^2$ даёт неупругое сечение (8.10).

Важный момент заключается в том, что упругое рассеяние при $|S_\ell| = 1$ может иметь место в отсутствие поглощения, в то время как обратная ситуация чисто неупругого процесса невозможна. Любое поглощение всегда

сопровождается упругим рассеянием. Это так называемый *эффект тени*, типичное проявление волновых свойств. Поглощение искажает падающую волну вырезая часть волнового фронта. При этом в фурье-разложении искажённой волны с необходимостью появляются новые (дифракционные) компоненты. Рис. 8.1 [?] показывает соотношение между возможными величинами упругого и неупругого сечения.

Полное сечение равно сумме упругого, уравнение (8.10), и неупругого, уравнение (8.10), вкладов,

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(2 - S_{\ell} - S_{\ell}^*) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(1 - \text{Re}S_{\ell}). \quad (8.11)$$

Сравнивая (8.11) с (8.8) мы опять приходим к оптической теореме (7.58).

8.3 Упругие фазы рассеяния

Эдесь мы более подробно рассмотрим случай чисто упругого рассеяния, когда фазы рассеяния δ_{ℓ} , определённые уравнением (8.1), действительны. Записывая $S_{\ell} - 1$ как $2i \exp(i\delta_{\ell}) \sin \delta_{\ell}$, выразим амплитуду рассеяния (8.8) в виде

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell}. \quad (8.12)$$

Асимптотика волновой функции (8.6) становится

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &\approx \frac{i}{2kr} \sum_{\ell} (-)^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) [e^{-ikr} - (-)^{\ell} S_{\ell} e^{ikr}] \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) [(-i)^{\ell} e^{2i\delta_{\ell} + ikr} - i^{\ell} e^{-ikr}] \\ &= \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) e^{i\delta_{\ell}} [e^{i(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})} - e^{-i(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})}] \\ &= \frac{1}{kr} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) e^{i\delta_{\ell}} \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_{\ell} \right). \end{aligned} \quad (8.13)$$

Из последнего выражения видно, что δ_{ℓ} есть сдвиг фазы ℓ -той парциальной волны по сравнению с асимптотикой (I.17.80) входящей плоской волны. Как мы уже отмечали, двойная фаза $2\delta_{\ell}$ в S_{ℓ} набирается на пути к центру и от центра.

В терминах фаз рассеяния упругое сечение (8.10) выглядит следующим образом,

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}. \quad (8.14)$$

Фаза рассеяния $\delta_{\ell} = n\pi$ при некоторой энергии отвечает отсутствию рассеяния в данной парциальной волне при данной энергии. Максимум рассеяния (*резонанс*) возникает при $\delta_{\ell} = \pi/2$. В резонансе парциальное сечение определяется не геометрическими параметрами системы, а длиной волны $\lambda = 2\pi/k$,

$$\sigma_{\ell}^{\text{max}} = \frac{4\pi(2\ell + 1)}{k^2} = \frac{2\ell + 1}{\pi} \lambda^2. \quad (8.15)$$

Этот предел волновой механики в четыре раза больше чем классическая площадь кольца (7.14).

Чтобы найти фазы рассеяния, нужно решить радиальное уравнение Шрёдингера для данной парциальной волны и найти решение $u_{\ell}(r)$, которое *регулярно* в нуле и имеет нужную асимптотику $\sim \sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})$. Этот асимптотический вид определяет фазу рассеяния δ_{ℓ} . Полная волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ может быть найдена как суперпозиция парциальных волн с коэффициентами $i^{\ell} \exp(i\delta_{\ell})$, см. последнюю строку в асимптотическом представлении $\psi(\mathbf{r})$ (8.14). На практике может быть удобнее найти пару взаимно комплексно сопряжённых решений $u_{\ell}^{(\pm)}$ с асимптотическим поведением $\sim \exp(\pm ikr)$. Эти функции образуют полный набор функций в континууме. Их поведение в начале координат определяется асимптотикой и не является регулярным. Но можно поискать их суперпозицию,

$$u_{\ell}(r) = A_{\ell} \left[u_{\ell}^{(-)}(r) - (-)^{\ell} S_{\ell} u_{\ell}^{(+)}(r) \right], \quad (8.16)$$

которая была бы регулярна в начале координат (сравните с (8.6)). Это требование определяет S_{ℓ} .

8.4 Аналитичность

S -матрица рассматриваемая как функция волнового вектора k может быть продолжена на комплексные значения этой величины, которая играет роль параметра в уравнении Шрёдингера. Здесь мы приводим только краткую идею этого подхода, который оказался крайне продуктивным.

Радиальная функция $u_\ell(r)$ имеет для действительных k вид (8.16) с соответствующей асимптотикой. Продолжим эту функцию на комплексные значения k . Фаза рассеяния δ_ℓ зависит от k и перестаёт быть действительной для комплексных k . Предположим, что при каком то значении $k = -i\kappa$, $\kappa > 0$, т.е. на отрицательной мнимой полуоси, фаза $\delta_\ell(-i\kappa) \rightarrow i\infty$. Это значит, что S -матрица обращается в ноль в этой точке,

$$S_\ell(-i\kappa) = e^{2i\delta_\ell(-i\kappa)} = 0. \quad (8.17)$$

В этом случае, только первый член, порождаемый $u_\ell^{(-)}$, выживает в асимптотике этой парциальной волны (8.16),

$$u_\ell(r) \sim e^{-i(-i\kappa)r} = e^{-\kappa r}. \quad (8.18)$$

Но это есть асимптотика волновой функции *связанного* состояния при отрицательной энергии

$$\varepsilon = (\hbar^2/2m)(-i\kappa)^2 = -\hbar^2\kappa^2/2m. \quad (8.19)$$

Можно заключить, что связанным состояниям с орбитальным моментом ℓ соответствуют нули матричного элемента $S_\ell(k)$ на отрицательной мнимой полуоси. Обратное утверждение вообще говоря неверно, поскольку имеющиеся связанные состояния не исчерпывают всех нулей $S_\ell(k)$.

Заметим теперь, что в уравнение Шрёдингера входит k^2 , а не k . Формальная замена $k \rightarrow -k$ должна давать то же решение $u_\ell(r)$ с каким то не зависящим от координат фактором. Но, при такой замене

$$\begin{aligned} [e^{-ikr} - (-)^\ell S_\ell(k)e^{ikr}] &\rightarrow [e^{ikr} - (-)^\ell S_\ell(-k)e^{-ikr}] \\ &= -(-)^\ell S_\ell(-k)[e^{-ikr} - (-)^\ell S_\ell^{-1}(-k)e^{ikr}]. \end{aligned} \quad (8.20)$$

Отсюда находим, что

$$S_\ell^{-1}(-k) = S_\ell(k), \quad (8.21)$$

т.е. нулям на нижней мнимой полуоси, $k = -i\kappa$, соответствуют *полюса* $S_\ell(k)$ на верхней мнимой полуоси, $k = +i\kappa$. Таким образом, знание S -матрицы на действительной оси и её аналитических свойств даёт также информацию о связанных состояниях без явного использования гамильтониана или волновой функции.

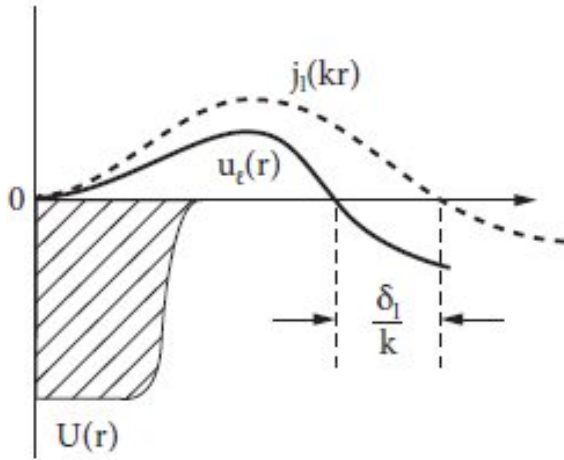


Рис. 8.2. Рассеяние на потенциальной яме.

8.5 Рассеяние при низких энергиях: примеры

Мы вывели формальное решение задачи рассеяния в центральном поле конечного радиуса. Все наблюдаемые величины выражаются через бесконечный набор фаз рассеяния δ_ℓ . Разложение по парциальным волнам особенно удобно при низких энергиях, когда фазы убывают с ростом ℓ и несколько первых членов разложения по парциальным волнам хорошо приближают полное решение.

Как упоминалось ранее, область низких энергий определяется отношением характерного размера потенциала R к длине волны λ относительного движения. Когда $R/\lambda \propto kR$ мало, различие в фазах между волнами идущими в разных направлениях мало и ось падающего пучка не выделена. Это значит, что рассеяние почти изотропно, так что наиболее существенными являются вклады s -волны и возможно нескольких других нижайших парциальных волн. В этом случае можно обрезать ряд по парциальным волнам на малых ℓ .

Задача 8.2

Найти сечение рассеяния частицы малой энергии на притягивающей потенциальной яме глубиной U_0 и радиусом R , Рис. 8.2.

Решение В случае низкой энергии длина волны велика по сравнению с размерами ямы, $kR \ll 1$. Основной вклад в сечение даёт s -волна. Уравнение

Шрёдингера для функции $u \propto r\psi$ и для $\ell = 0$ записывается как

$$u'' + k^2 u = 0, \quad k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}, \quad r > R; \quad (8.22)$$

$$u'' + k'^2 u = 0, \quad k'^2 = \frac{2m(\varepsilon + U_0)}{\hbar^2}, \quad r < R. \quad (8.23)$$

Решение исчезающее в нуле и имеющее нужную асимптотику очевидно,

$$u = A \sin k'r, \quad r < R; \quad u = \sin(kr + \delta), \quad r > R. \quad (8.24)$$

Поскольку общая нормировка несущественна, мы имеем только один неизвестный коэффициент A . Вместе с фазой рассеяния δ он должен быть найден из условия непрерывности волновой функции при $r = R$. Логарифмическая производная даёт

$$\delta = \tan^{-1} \left(\frac{k}{k'} \tan(k'R) \right) - kR. \quad (8.25)$$

парциальное сечение (8.14) равно

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta. \quad (8.26)$$

При очень низких энергиях

$$k \rightarrow 0, \quad k'^2 \rightarrow k_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}. \quad (8.27)$$

Если $k_0 R$ не слишком близко к $\pi/2$, то при низких энергиях фаза рассеяния стремится к нулю линейно по k ,

$$\delta \approx kR \left[\frac{\tan(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right]. \quad (8.28)$$

При этом, амплитуда рассеяния (8.12) и сечение (8.26) конечны. Они традиционно выражаются через *длину рассеяния*

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} f. \quad (8.29)$$

В нашем случае

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta}{k} = -R \left[\frac{\tan(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right], \quad (8.30)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_0 = 4\pi a^2. \quad (8.31)$$

В мелкой яме,

$$k_0 R \ll 1, \quad \tan(k_0 R) \approx k_0 R [1 + (k_0 R)^2/3], \quad (8.32)$$

мы находим

$$a = -R \frac{(k_0 R)^2}{3}, \quad \sigma_0 = 4\pi R^2 \frac{(k_0 R)^4}{9} = \frac{16\pi}{9} \frac{m^2 U_0^2 R^6}{\hbar^4}, \quad (8.33)$$

т.е. длина рассеяния много меньше радиуса ямы и сечение много меньше геометрического сечения ямы. Этот результат может также быть получен используя первое борновское приближение. Действительно, из (31.81) мы получаем при $q \rightarrow 0$

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^R dr r^2 (-U_0) = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 \frac{R^3}{3}, \quad (8.34)$$

что даёт то же самое сечение (8.33). Большая длина волны перекрывает всю область рассеяния и длина рассеяния определяется в этом пределе *объёмом* ямы.

Будем теперь углублять яму сохраняя k малым, но конечным. При $k_0 R = \pi/2$, мы приходим к *резонансу*. Величина

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \frac{\tan(k' R)}{k'} \quad (8.35)$$

мала по сравнению с R . Мы можем пренебречь членом $-kR$ в (8.25) и получить сечение вблизи резонанса:

$$\delta = \tan^{-1} \frac{k}{\gamma}, \quad \sigma_0 = \frac{4\pi}{\gamma^2 + k^2}. \quad (8.36)$$

Для резонансной ямы, при $k \rightarrow 0$, сечение растёт до бесконечности. Условие резонанса указывает на появление связанного состояния в яме, см раздел II.2.6. При малых положительных энергиях волновая функция внутри ямы слабо зависит от энергии и очень близка к волновой функции появившегося связанного состояния. Увеличивая глубину ямы мы увидим уменьшающееся сечение; резонансное условие (8.36) больше не выполняется и мы можем снова вернуться к нерезонансной формуле, которая даёт ноль сечения (8.31) при $\tan(k_0 R) = k_0 R$. На каждом рождении нового связанного состояния есть резонанс так, что сечение быстро колеблется между малым

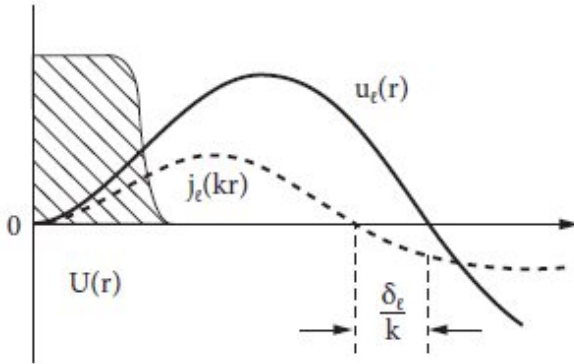


Рис. 8.3. Рассеяние на потенциальном барьере.

и большим значением в зависимости от глубины. *Формула Вигнера* для резонансного сечения (8.36) действительна для околорезонансной глубины, когда его небольшое изменение приводит к появлению или исчезновению дискретного уровня. Состояние с $\ell = 0$, которое не связано, но стало бы связанным при небольшом углублении ямы называется *виртуальным уровнем*.

Задача 8.3

Вычислить сечение рассеяния при низкой энергии частицы на отталкивающем потенциальном барьере (высота U_0 , радиус R), Рис. 8.3.

Решение Решение во внутренней области под барьером, $\varepsilon < U_0$, есть

$$u = A \sinh k'R, \quad k'^2 = \frac{2m(U_0 - \varepsilon)}{\hbar^2}. \quad (8.37)$$

Фаза рассеяния даётся [сравни с (8.25)]

$$\delta = \tan^{-1} \left(\frac{k}{k'} \tanh(k'R) - kR \right) \quad (8.38)$$

Поскольку $\tanh x$ меняется от -1 до 1 , Резонансов нет и в пределе низких энергий мы находим длину рассеяния

$$a = -R \left[\frac{\tanh(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right] > 0, \quad k_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}, \quad (8.39)$$

отметим, что знак длины рассеяния положителен. Сечение даётся выражением

$$\sigma_0 = 4\pi R^2 \left(\frac{\tanh(k_0 R)}{k_0 R} - 1 \right)^2. \quad (8.40)$$

Для барьера бесконечной высоты, как следует из смысла фазы рассеяния,

$$U_0 \rightarrow \infty, \quad a \rightarrow R, \quad \delta \rightarrow -kR; \quad (8.41)$$

сечение совпадает с площадью поверхности сферы,

$$\sigma_0 \rightarrow 4\pi R^2. \quad (8.42)$$

Это типичный волновой эффект: волна большой длины взаимодействует со всей поверхностью, в то время как классическая частица чувствует только площадь πR^2 непроницаемого препятствия, см. (7.13). Для энергий выше барьера, $\varepsilon > U_0$, может опять возникнуть резонансное поведение.

Задача 8.4

Найти явный вид углового распределения для потенциального рассеяния учитывая только s -волну, p -волну и их интерференцию.

Решение Дифференциальное сечение равно $|f|^2$, где амплитуда рассеяния f даётся разложением по парциальным волнам, которое в нашем случае имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{1}{k^2} \left[\sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1) \cos \theta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta \right]. \quad (8.43)$$

Интерференция s - и p -волн противоположной чётности нарушает симметрию по отношению к замене $\theta \rightarrow \pi - \theta$.

8.6 Фазы и их зависимость от энергии

Чтобы оценить зависимость фаз рассеяния от ℓ , выразим фазы через точные радиальные функции $u_\ell(r)$.

Вводя безразмерную переменную $x = kr$, радиальное уравнение Шрёдингера переписывается в виде

$$u_\ell'' + \left[1 - \frac{U}{\varepsilon} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] u_\ell = 0, \quad (8.44)$$

где производная берётся по x . В подобном уравнении для волновой функции v_ℓ свободного движения,

$$v_\ell'' + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right] v_\ell = 0, \quad (8.45)$$

решение с правильной асимптотикой даётся, как мы знаем, в виде

$$v_\ell(x) = x j_\ell(x). \quad (8.46)$$

Удобно определить *вронскиан*

$$W_\ell(r) = v'_\ell u_\ell - v_\ell u'_\ell \quad (8.47)$$

функций v_ℓ и u_ℓ . В асимптотической области мы нормируем наши функции так, чтобы

$$v_\ell \approx \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right), \quad u_\ell \approx \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right). \quad (8.48)$$

Тогда вронскиан (8.47) является в асимптотической области константой

$$W_\ell(x \gg R) = \sin \delta_\ell. \quad (8.49)$$

Фаза может быть найдена из уравнения для вронскиана,

$$W'_\ell + \frac{U}{\varepsilon} u_\ell v_\ell = 0, \quad (8.50)$$

которое легко получить умножая (8.44) на v_ℓ , (8.45) на u_ℓ и вычитая одно из другого. Интегрируя уравнение (8.50) от $x = 0$ до $x = X$, мы находим

$$W_\ell(X) = W_\ell(0) - \int_0^X dx \frac{U(x)}{\varepsilon} u_\ell(x) v_\ell(x). \quad (8.51)$$

Предположим, что вблизи начала координат потенциал $U(x)$ либо не имеет сингулярности, либо имеет сингулярность слабее центробежной энергии $\sim \ell(\ell+1)/x^2$, так что можно пренебречь U в уравнении (8.44). В этом случае при $x \rightarrow 0$ регулярные решения обоих уравнений пропорциональны друг другу и $W_\ell(0) = 0$. В пределе $X \rightarrow \infty$, уравнения (8.49) и (8.51) определяют фазы рассеяния *по модулю* 2π ,

$$\sin \delta_\ell = - \int_0^\infty dx \frac{U(x)}{\varepsilon} u_\ell(x) v_\ell(x), \quad (8.52)$$

через решения $u_\ell(x)$.

Результат (8.52) является точным для "хороших" потенциалов. Для достаточно больших ℓ , можно заменить $u_\ell(x)$ в подинтегральном выражении на свободную функцию v_ℓ . Это было бы очевидно в классическом пределе, где

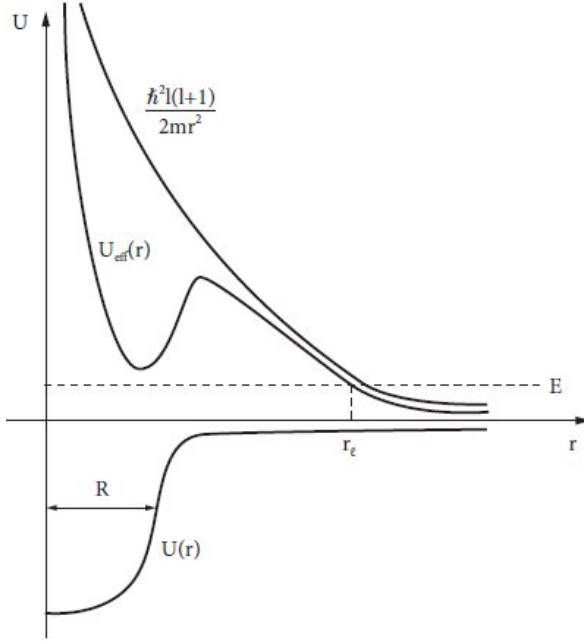


Рис. 8.4. Эффективный потенциал с центробежным членом для момента ℓ и точкой поворота $r_\ell > R$.

большие ℓ соответствуют большим прицельным параметрам $b_\ell \simeq l/k > R$, которые определяют траекторию лежащую вне области взаимодействия. Но такое же заключение можно сделать и в квантовом случае. Центробежный потенциал $\hbar^2 \ell(\ell+1)/2mr^2$ сильно подавляет обе функции u_ℓ и v_ℓ под барьером, где они пропорциональны $r^{\ell+1}$. Точки поворота для обеих функций почти совпадают, Рис. 8.4, если они лежат дальше от начала координат, чем R . В этом случае влияние потенциала U везде мало и можно ожидать также малость фаз рассеяния.

Точки поворота $\varepsilon = U_\ell(r)$ находятся при $r_\ell > R$, если

$$U(r_\ell) \ll \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr_\ell^2} \approx \varepsilon < \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mR^2}. \quad (8.53)$$

Это выполняется при

$$\ell(\ell+1) > \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} R^2 = (kR)^2, \quad (8.54)$$

что фактически совпадает с приведённой выше классической оценкой. Если это условие выполняется, то фаза рассеяния δ_ℓ мала, $\sin \delta_\ell \approx \delta_\ell$, и мы

получаем из (8.52)

$$\delta_\ell \approx - \int_0^\infty dx \frac{U(x)}{\varepsilon} v_\ell^2(x). \quad (8.55)$$

Это выражение имеет простой смысл: присутствие потенциала действующего на невозмущённую волновую функцию меняет фазу её осцилляций на среднюю величину потенциала измеренную в естественных временных единицах $\sim 1/\varepsilon$.

При достаточно низких энергиях $kR \ll 1$, условие (8.54) справедливо для всех $\ell \neq 0$. Отсюда следует важное практическое заключение, что в рассеянии при низких энергиях только s -волна может иметь заметную фазу рассеяния. С увеличением энергии начинают давать вклад и высшие парциальные волны. Подинтегральное выражение в (8.55) ограничено радиусом действия потенциала R . В низкоэнергетическом пределе поведение волновых функций здесь определяется центробежным членом $v_\ell(x) \approx C_\ell x^{\ell+1}$ с константой C_ℓ из (II.2.80). Тогда (8.55) непосредственно даёт низкоэнергетическое поведение фаз рассеяния ($\ell \neq 0$),

$$\delta_\ell \approx - \int_0^\infty dx \frac{U(x)}{\varepsilon} C_\ell^2 x^{2\ell+2} = -C_\ell^2 \frac{k^{2\ell+3}}{\varepsilon} \int_0^\infty dr U(r) r^{2\ell+2}. \quad (8.56)$$

Фазы рассеяния убывают с ℓ ,

$$\delta_\ell \propto k^{2\ell+1} \propto \varepsilon^{\ell+1/2}. \quad (8.57)$$

В заключение можно утверждать, что при низких энергиях (8.53) можно ограничиться низшими парциальными волнами. По этой причине, разложение по парциальным волнам, будучи эффективным при низких энергиях, дополняет борновское приближение. Для дальнедействующих потенциалов, которые спадают степенным образом, $U \propto 1/r^\alpha$, требуются отдельные, более аккуратные оценки, см. [LL3, § 132].

Отметим, что в притягивающем потенциале, $U < 0$, фазы рассеяния (8.56) положительны, в то время как для отталкивающего потенциала, $U > 0$, они отрицательны. Это легко понять из сравнения реального решения со свободным: частица в области притяжения проводит больше времени, Рис. 8.2 и 8.3 (предполагается, что притягивающий потенциал не имеет связанных состояний).

Задача 8.5

- а) Для изотропного потенциала $U(r)$ проверить, что (31.74) в точности совпадает с амплитудой (8.12) найденной методом парциальных волн.

- б) Показать, что борновское приближение эквивалентно результату полученному разложением по парциальным волнам, если фазы рассеяния малы и могут быть вычислены согласно (8.55).

Решение Для доказательства нужно воспользоваться разложением точного решения по парциальным волнам, разложением плоской волны по парциальным волнам и точным выражением (8.52) для фаз рассеяния.

8.7 Длина рассеяния

Мы знаем, что термин "низкие энергии" в задаче рассеяния обычно значит, что длина волны $1/k = \hbar/mv$ относительного движения велика по сравнению с радиусом действия сил R_0 ,

$$kR_0 < 1. \quad (8.58)$$

Например, в нейтрон-протонном рассеянии это условие выполняется вплоть до энергий относительного движения ε до ~ 5 (~ 10 МэВ в системе покоя протона). В области низких энергий только s -волновое рассеяние, $\ell = 0$, может иметь заметную фазу рассеяния δ_0 и давать вклад в сечение. Благодаря дополнительному факту, что ядерные силы гораздо слабее в пространственно нечётных состояниях, p -волновое рассеяние подавлено, так что в действительности сечение $n - p$ рассеяния почти изотропно до $\varepsilon \approx 10 - 15$ MeV.

Рассмотрим более детально s -волновое рассеяние в короткодействующем потенциале. Результаты оказываются универсальными в том смысле, что они могут быть описаны малым числом физических параметров, которые нечувствительны к деталям формы потенциала.

Упругое сечение рассеяния для s -волны (в этом разделе мы обсуждаем только s -рассеяние и индекс $\ell = 0$ будем опускать) может быть просто выражено через амплитуду рассеяния,

$$f = e^{i\delta} \frac{\sin \delta}{k}, \quad \sigma = 4\pi |f|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta. \quad (8.59)$$

Наш парциально-волновой анализ был развит для центрального потенциала $U(r)$. Для любой конкретной формы короткодействующего потенциала мы можем найти радиус R такой, что при $r > R$ потенциал исчезающе мал и может быть опущен. Вне потенциала решение $\psi(r) = u(r)/r$ задачи рассеяния имеет универсальную форму для $\ell = 0$,

$$u(r) = \frac{e^{i\delta}}{k} \sin(kr + \delta), \quad r > R, \quad (8.60)$$

где фаза рассеяния δ зависит от энергии или от k . Условие сшивки внешней функции (8.60) с внутренней функцией из области потенциала может быть сформулировано, как и в проблеме связанных состояний, с помощью логарифмической производной λ внутренней волновой функции,

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=R-0} \equiv \lambda = k \cot(kR + \delta). \quad (8.61)$$

Таким образом, фаза рассеяния δ определяется через единственный параметр λ . Для прямоугольной ямы или барьера точное решение изучалось соответственно в *Задачах* 8.2 и 8.3. Сразу же виден один частный случай: для очень сильного отталкивающего потенциала волновая функция близка к нулю на границе, в то время как её производная конечна, так что $\lambda \rightarrow \infty$, и фаза рассеяния есть

$$\delta = -kR, \quad (8.62)$$

что подтверждает физический смысл фазы рассеяния: волна не проникает внутрь и соответственно набирает меньшую фазу.

В общем случае, фаза рассеяния при малых k пропорциональна k . Это имело место в вышеупомянутых задачах. Коэффициент пропорциональности, взятый с обратным знаком, называется *длиной рассеяния* (8.29),

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta(k)}{k} = -a. \quad (8.63)$$

Согласно уравнению (8.59) связывающему фазу и амплитуду рассеяния f , длина рассеяния, это предельное значение амплитуды f при низких энергиях,

$$\lim_{k \rightarrow 0} f = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{e^{i\delta} \sin \delta}{k} = -a. \quad (8.64)$$

Величина сечения (8.59) в этом пределе равна

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma = 4\pi a^2. \quad (8.65)$$

Задача 8.6

Вычислить длину рассеяния для потенциала Рис. 8.5 с твёрдым отталкивающим кором при $r = R_0$ и притягивающей ямой глубины U_0 между

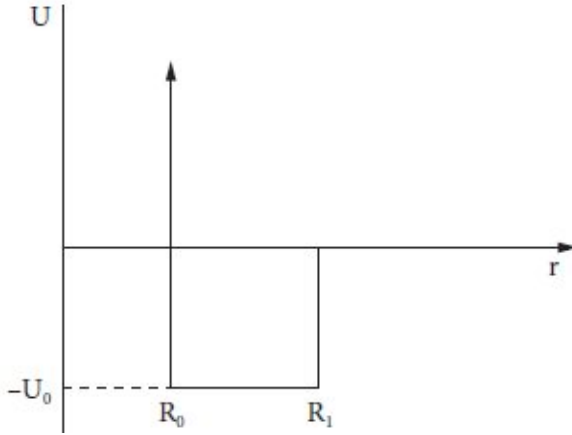


Рис. 8.5. Потенциал для задачи 8.6

$r = R_0$ и $r = R_1$ (грубая картина молекулярного потенциала типа Ван дер Ваальса.)

Решение Решая уравнение Шрёдингера мы находим

$$a = R_1 - \frac{\tan[k_0(R_1 - R_0)]}{k_0}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{mU_0}{\hbar^2}}. \quad (8.66)$$

Без твёрдого кора, $R_0 = 0$, результат совпадает с (8.39). Длина рассеяния опять имеет резонансы для притягивающей ямы при $k_0(R_1 - R_0) = \pi(n - 1/2)$ для целых $n \geq 1$.

Для непроницаемой стенки длина рассеяния совпадает с радиусом R стенки. Однако, в общем случае, значение длины рассеяния может значительно отличаться от радиуса потенциала R . Длина рассеяния может быть непосредственно определена по поведению внешней волновой функции (8.60), которую в пределе $k \rightarrow 0$, можно записать около границы как линейную функцию

$$u(r) \approx r - a. \quad (8.67)$$

Поэтому длина рассеяния задается величиной радиальной координаты в точке, где линейная экстраполяция волновой функции (8.67) обращается в ноль.

Для мелких ям, не имеющих связанных состояний, рис. 8.6 (а), внутренняя волновая функция возрастает на границе, $\lambda > 0$, и экстраполяция

(8.67) приводит к $a < 0$. Углубляя яму все больше и больше, мы увеличиваем внутренней волновой вектор и сдвигаем точку пересечения влево. В конце концов абсолютное значение длины рассеяния превышает радиус сил R . При критической глубине, соответствующей появлению связанного состояния длина рассеяния идет в $-\infty$, рис. 8.6 (b), так называемый *унитарный предел*. Если яма имеет связанное состояние, предельное поведение фазового сдвига при нулевой энергии должно быть определено как $\lim_{k \rightarrow 0} \delta = \pi - ka$. Если яма становится еще более глубокой, связанное состояние спускается вниз по энергии. Тогда, внутренняя волновая функция имеет отрицательную производную на границе $\lambda < 0$, а длина рассеяния возвращается к действительной оси от $+\infty$, Рис. 8.6 (c). С углублением потенциальной ямы, мы наблюдаем периодически появление новых связанных состояний, и фазовый сдвиг каждый раз проходит через π . Так как при очень высокой энергии (формально при $r \rightarrow \infty$) движение становится свободным, разница между $\delta(k \rightarrow 0)$ и $\delta(k \rightarrow \infty)$ равна $n\pi$, где n является числом связанных состояний в яме (теорема Левинсона).

8.8 Резонансное рассеяние при низких энергиях

Большое отрицательное значение длины рассеяния показывает, что потенциальная яма почти готова приобрести связанное s -волновое состояние. В таком случае говорят, что обычно есть *виртуальный уровень*, сравнить с задачей 8.2. Для характеристики энергетической зависимости амплитуды рассеяния и сечения за пределом $k \rightarrow 0$, особенно в случае слабо связанного или виртуального состояния, мы включаем следующий член низкоэнергетического разложения (Л.Ландау, Я. Смородинский 1944).

Для упругого рассеяния в центральном поле, отсутствие поглощения позволяет один преобразовать выражение (7.61) для парциальных амплитуд f_ℓ (собственные значения \hat{f}) в уравнение

$$\text{Im} f_\ell = k |f_\ell|^2, \quad \text{or} \quad \text{Im} \left(\frac{1}{f_\ell} \right) = -k. \quad (8.68)$$

Поэтому, общее выражение для амплитуды f_ℓ совместимое с условием унитарности имеет вид $1/f_\ell = g_\ell - ik$, или

$$f_\ell = \frac{1}{g_\ell - ik}, \quad (8.69)$$

где g_ℓ (для действительной энергии) является *действительной* функцией с размерностью обратной длины. Простая алгебра с использованием

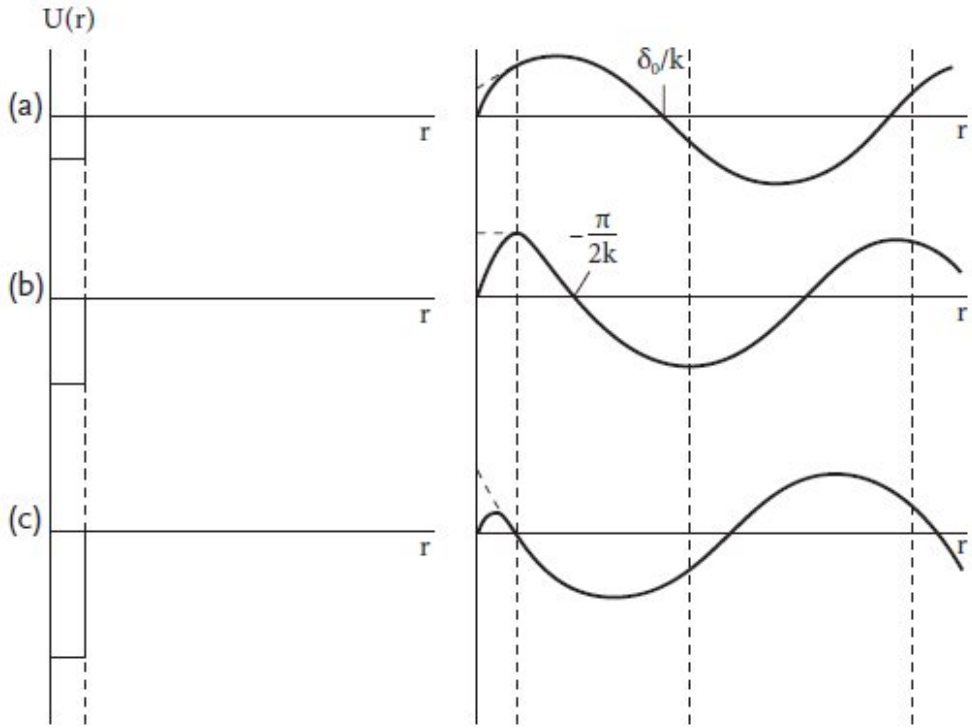


Рис. 8.6. Радиальные волновые функции для отрицательной (а) , почти бесконечной (b) и положительной (с) длины рассеяния

соотношения $f_\ell = \exp(i\delta_\ell) \sin \delta_\ell/k$ определяет функцию $g_\ell(k)$ как

$$g_\ell = k \cot \delta_\ell. \quad (8.70)$$

Будучи действительной при действительной энергии, g_ℓ может рассматриваться как функция ε , т. е. k^2 . При низких энергиях, как мы видели в (8.57), $\delta_\ell \propto k^{2\ell+1}$. Поэтому $f_\ell \propto k^{2\ell}$, и разложение g_ℓ начинается с члена $\sim 1/k^{2\ell}$. Для s -волнового рассеяния, функция $g_0(k)$ начинается с константы, $g_0 \rightarrow \gamma$ в пределе низких энергий. Сравнивая (8.69) с определением длины рассеяния, мы можем идентифицировать

$$g_0(0) = \gamma = -\frac{1}{a}. \quad (8.71)$$

В этом приближении мы можем учесть следующий член в знаменателе (8.69), который мнимый и линеен по k , и получить

$$f_0 = -\frac{1}{(1/a) + ik} \equiv -\frac{1}{\gamma + ik}. \quad (8.72)$$

Это даёт сечение за предельным значением (8.65),

$$\sigma = \frac{4\pi}{\gamma^2 + k^2} = \frac{4\pi a^2}{1 + a^2 k^2}, \quad (8.73)$$

а также его зависимость от энергии; сравнить с (8.36).

В нашем кратком обсуждении аналитичности, раздел 8.4, мы отмечали, что аналитическое продолжение S -матрицы в комплексную плоскость энергий имеет полюса в точках соответствующих энергиям связанных состояний. Полюс (8.69) на верхней мнимой оси k соответствует $k \rightarrow ik$ где κ эквивалентна энергии связи $\varepsilon = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$. Если есть решение уравнения $\kappa = -g_0(i\kappa)$ для малых κ , $\kappa R < 1$, мы имеем слабо связанное состояние и (8.71) показывает, что $\kappa \approx 1/a = -\gamma$. В этой ситуации, сечение (8.73) при *положительной* энергии $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ однозначно определяется малой энергией связи слабо связанного состояния (*Е. Вигнер, 1933*),

$$\sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{E + \varepsilon}. \quad (8.74)$$

Это так называемое *резонансное рассеяние*. Сечение было бы бесконечным, если бы было возможным создать падающий пучок с *отрицательной* энергией $E = -\varepsilon$. Поскольку энергия связи мала, то пучок с малой энергией находится почти "в резонансе". Но фаза рассеяния δ_0 здесь близка к π , в отличие от истинного резонанса, где $\delta \approx \pi/2$, ка уже отмечалось в связи с *задачей 8.2*.

Выражение (8.73) фактически носит более общий характер, будучи справедливым даже если нет связанных уровней. В этом случае $\gamma^2 \equiv 2m|\varepsilon|/\hbar^2$ определяет энергию $|\varepsilon|$ *виртуального уровня*, который стал бы реальным связанным состоянием, если бы яма была немного глубже. С заменой $\varepsilon \rightarrow |\varepsilon|$, резонансная формула (8.74) приложима к обоим случаям. Такая ситуация реализуется в нейтрон-протонном рассеянии в синглетном спиновом состоянии. Синглетная длина рассеяния a_s будучи велика и отрицательна показывает, что глубина ямы близка к критическому значению для появления связанного состояния. Соответствующая виртуальная энергия определённая через сечение при нулевой энергии E , или через длину

рассеяния,

$$\varepsilon_{\text{virt}} = \frac{2\pi\hbar^2}{m\sigma(E \rightarrow 0)} = \frac{\hbar^2}{2ma_s^2}, \quad (8.75)$$

очень мала в ядерном масштабе, $\varepsilon_{\text{virt}} \approx 70$ keV. Поэтому при низких энергиях синглетное $n - p$ рассеяние значительно превосходит триплетное.

Задача 8.7

В нейтрон-протонном рассеянии при низких энергиях полный спин S пары сохраняется, но длины рассеяния различны для $S = 0$ и $S = 1$ из-за спин-спиновой части ядерных сил. Полагая, что триплетная a_t и синглетная a_s длины $n - p$ рассеяния известны, найти вероятность рассеяния с переворотом спина (спин-флип) неполяризованных пучков при очень низких энергиях.

Решение Имеются четыре спиновых состояния у $n - p$ пар, см. раздел II.7.3. Для триплетных состояний с $S_z = \pm 1$, нет переворота спина и сечение равно $4\pi a_t^2$. Состояния с $S_z = 0$ должны быть переписаны в базисе χ_{SS_z} с фиксированной величиной S ,

$$|n \uparrow p \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10} + \chi_{00}), \quad (8.76)$$

$$|n \downarrow p \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10} - \chi_{00}). \quad (8.77)$$

Рассеянная волна для начального состояния (8.76) пропорциональна

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(a_t\chi_{10} + a_s\chi_{00}), \quad (8.78)$$

или, возвращаясь к состояниям сопредельной проекцией спина,

$$\frac{1}{2}(a_t + a_s)|n \uparrow p \downarrow\rangle + \frac{1}{2}(a_t - a_s)|n \downarrow p \uparrow\rangle. \quad (8.79)$$

Первый член в (8.79) определяет сечение без переворота спина, $4\pi(1/4)(a_t + a_s)^2 = \pi(a_t + a_s)^2$; второй член определяет сечение с переворотом спина $\pi(a_t - a_s)^2$. Такие же результаты имеют место и для начального состояния (8.77). Все четыре начальных состояния равновероятны. Поэтому, полное сечение усреднённое по проекциям спина равно

$$\sigma = \frac{1}{4}[2 \cdot 4\pi a_t^2 + 2\pi(a_t + a_s)^2 + 2\pi(a_t - a_s)^2]. \quad (8.80)$$

Сечение с переворотом спина равно

$$\sigma_{\text{flip}} = \frac{1}{4} \cdot 2\pi(a_t - a_s)^2, \quad (8.81)$$

и вероятность переворота спина находится как

$$\frac{\sigma_{\text{flip}}}{\sigma} = \frac{(a_t - a_s)^2}{4a_t^2 + (a_t + a_s)^2 + (a_t - a_s)^2}. \quad (8.82)$$

Для известных значений длин рассеяния вероятность (8.82) равна 0.65.

8.9 Эффективный радиус

Следующий член низкоэнергетического разложения амплитуды рассеяния (8.69), или функции g_0 , из (8.70, 8.71), квадратичен по k ,

$$g_0(k) = k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0k^2 + O(k^4). \quad (8.83)$$

Это определение вводит новый параметр размерности длины r_0 , который называется *эффективный радиус*. Добавка к s -волне, связанная с эффективным радиусом более важна, чем малый вклад p -волны, который даёт поправку более высокого, $\sim (kR)^3$, порядка к амплитуде рассеяния. Разложения подобные (8.83), когда общий вид амплитуды рассеяния (или других характеристик взаимодействия частиц) устанавливается из аналитичности и других общих ограничений, а параметры находятся из экспериментальных данных, широко используются в так называемой *эффективной теории поля* [21].

В этом продвинутом приближении амплитуда рассеяния (8.69) может быть представлена как

$$f_0(k) = \frac{1}{(-1/a) + (r_0k^2/2) - ik} \quad (8.84)$$

Для полюса $k = i\kappa$ аналитического продолжения мы имеем теперь

$$\kappa = \frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0\kappa^2. \quad (8.85)$$

В качестве примера мы обсудим приложение к $n-p$ рассеянию при низких энергиях. Значения длин рассеяния и эффективных радиусов, которые используются в (8.85) различны для триплетного и синглетного состояний.

Выражение (8.85) позволяет вычислить триплетный эффективный радиус r_{0t} через триплетную длину рассеяния a_t и энергию связи дейтрона $\varepsilon = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$ (единственное связанное $n - p$ состояние, *дейтрон*, имеется в спиновом триплете, $S = 1$). Экспериментальные данные дают $r_{0t} = 1.7$ ф., в согласии с (8.85), и $r_{0s} = 2.7$ ф.. Эффективный радиус всегда положителен [22] и имеет величину близкую к радиусу сил. Поэтому, он предпочтителен, как мера радиуса действия сил, по сравнению с длиной рассеяния, которая будучи очень чувствительной к существованию связанных состояний, может менять знак и сильно отличаться от R .

Оба параметра – длина рассеяния и эффективный радиус не дают конкретной информации о форме и детальном поведении потенциала. Более высокие порядки в разложении (8.83) были бы более конкретны, но они экранируются вкладами высших парциальных волн. На практике, низкоэнергетическое разложение мало полезно за рамками приближения эффективного радиуса.

8.10 Рассеяние со спин-орбитальным взаимодействием

Число наблюдаемых возрастает, если падающий пучок *поляризован* или/и меряется поляризация конечных частиц. В этих случаях мы должны рассматривать амплитуду рассеяния как *оператор по отношению к спиновым переменным*, в дополнение к её роли как оператору в координатном пространстве, ответственному за рассеяние $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$, см. уравнение (7.60).

Рассмотрим рассеяние частицы со спином $1/2$ (например нуклон) на системе со спином 0 (например ядро). Мы обобщим понятие упругого рассеяния включив сюда случаи, когда вырожденные спиновые состояния частицы могут меняться при рассеянии наравне с направлением движения. Относительная кинетическая энергия при этом также не меняется, что обосновывает термин "упругое". Пусть падающая волна находится в заданном спиновом состоянии,

$$\psi_i = e^{ikz} \chi_\mu(s_z), \quad (8.86)$$

со спиновой функцией χ_μ для определённой проекции спина $\mu = \pm 1/2$ на ось пучка z . Детектор регистрирует рассеянную волну в направлении \mathbf{k}' и в спиновом состоянии $\chi_{\mu'}$. Случай $\mu' \neq \mu$ называют рассеянием с переворотом спина (*спин-флип* рассеяние), как в задаче 8.7. Это конечно возможно только если взаимодействие с мишенью зависит от спиновых переменных; в противном случае проекция спина сохраняется.

Важным практическим примером является *спин-орбитальное взаимодействие* $\sim (\vec{\ell} \cdot \mathbf{s})$; его роль в атомной физике обсуждалась в разделе II.8. В *неполяризованном* пучке спиновые проекции $\pm 1/2$ находятся с равной вероятностью. Необходимо подчеркнуть, что такой пучок не может описываться чистой волновой функцией. Результаты должны быть получены отдельно для каждой возможной проекции μ и затем арифметически усреднены по распределению вероятностей проекций начального спина. Это пример *смешанного квантового состояния* описываемого *матрицей плотности*, см. раздел IV.13.

Таким образом, начальное состояние описывается *ансамблем* поляризаций. Вектор *поляризации* \mathbf{P} начального пучка есть среднее значение оператора спина \mathbf{s} усреднённого по ансамблю и отнесённого к его макимальному значению $1/2$,

$$\mathbf{P} = \frac{\overline{\langle \mathbf{s} \rangle}}{1/2} = \overline{\langle \vec{\sigma} \rangle}, \quad (8.87)$$

где сначала берётся диагональный матричный элемент $\langle \vec{\sigma} \rangle$ и затем усредняется (черта вверху) по ансамблю частиц пучка. and

В общем случае начальное состояние не является аксиально симметричным будучи характеризуемым вектором поляризации, в дополнение к направлению z падения. Рассеяние теперь может зависеть от обоих углов рассеянной частицы, θ и φ . Вместо (7.49), асимптотический вид волновой функции становится

$$\psi(\mathbf{r}, s_z) \approx \left[e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \hat{f}(\theta, \varphi) \right] \chi_\mu(s_z), \quad (8.88)$$

где во входящей волне спиновое состояние такое же, как в начальном пучке, в то время как в расходящейся волне оно может быть изменено амплитудой рассеяния \hat{f} ; шляпка здесь обозначает оператор в спиновом пространстве,

$$\hat{f} \chi_\mu = \sum_{\mu'} f_{\mu' \mu} \chi_{\mu'}. \quad (8.89)$$

Для упругого рассеяния на *бесспиновой* мишени или на любой *неполяризованной* мишени со случайным распределением спинов, по которым нужно усреднять, сохраняющимися квантовыми числами являются ℓ , чётность $(-)^{\ell}$, $j = \ell \pm 1/2$ и j_z . Проекции ℓ_z и s_z в общем случае не сохраняются по отдельности. Входящая волна с фиксированными $\ell_z = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]_z / \hbar = 0$ и $s_z = \mu$ не имеет определённого j будучи суперпозицией $j = \ell \pm 1/2$. Но,

взаимодействие с мишенью зависит от точных квантовых чисел, включая j . Как было видно из примера со спин-орбитальной связью в разделе II.8.1, взаимодействие различно для двух возможных значений j . Компонента с определённым j переходит в себя приобретая только фазу. Это значит, что S -матрица диагональна в (ℓ, j) -представлении. Её диагональные матричные элементы дают фазы рассеяния,

$$S_{\ell j} = e^{2i\delta_{\ell j}}. \quad (8.90)$$

Мы имеем теперь две фазы рассеяния $\delta_{\ell, j=\ell\pm 1/2}$, которые мы обозначим как $\delta_{\ell}^{(\pm)}$; соответствующие матричные элементы (8.90) равны $S_{\ell}^{(\pm)}$.

Начальное состояние может быть разложено с помощью ККГ по базису состояний с определённым j , и тогда каждая из них приобретает свою фазу. Вместо вычисления ККГ мы можем получить желаемое разложение в операторном виде. Пусть $\Lambda_{\ell}^{(\pm)}$ есть проекционные операторы отбирающие компоненты с $j = \ell \pm 1/2$ из любого произведения ℓ -той парциальной волны и спиновой функции спина $1/2$. В терминах этих операторов, оператор амплитуды рассеяния (8.8) становится

$$\hat{f}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left[(S_{\ell}^{(+)} - 1) \Lambda_{\ell}^{(+)} + (S_{\ell}^{(-)} - 1) \Lambda_{\ell}^{(-)} \right] P_{\ell}(\cos \theta). \quad (8.91)$$

Скалярное произведение $(\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma}) = 2(\vec{\ell} \cdot \mathbf{s})$ имеет собственные значения ℓ и $-(\ell + 1)$ для $j = \ell + 1/2$ и $j = \ell - 1/2$, соответственно (*задача II.5.6*), и проекционные операторы даются выражениями

$$\Lambda_{\ell}^{(+)} = \frac{\ell + 1 + (\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma})}{2\ell + 1}, \quad \Lambda_{\ell}^{(-)} = \frac{\ell - (\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma})}{2\ell + 1}, \quad \Lambda_{\ell}^{(+)} + \Lambda_{\ell}^{(-)} = 1. \quad (8.92)$$

Зависимость от φ возникает в результате переворота спина вызываемого понижающими и повышающими операторами спина σ_{\pm} , которые сопровождаются в (8.92) дополняющими операторами ℓ_{\mp} компенсирующими переворот спина изменением орбитальной проекции.

Используя явный вид (8.92), амплитуда рассеяния (8.91) становится

$$\hat{f}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} \left[(\ell + 1)(S_{\ell}^{(+)} - 1) + \ell(S_{\ell}^{(-)} - 1) + (S_{\ell}^{(+)} - S_{\ell}^{(-)}) (\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma}) \right] P_{\ell}(\cos \theta). \quad (8.93)$$

Действие оператора $(\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma})$ на полином Лежандра легко вычислить в явном виде. Компоненты орбитального момента найдены в *задаче II.1.10*.

Компонента ℓ_z не даёт вклада в (8.93), так что

$$(\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma})P_\ell = i(\sigma_x \sin \varphi - \sigma_y \cos \varphi) \frac{dP_\ell}{d\theta}. \quad (8.94)$$

Производная $dP_\ell/d\theta$ есть *присоединённый полином Лежандра* $-P_{\ell 1}$, см. (II.1.139) (сферическая функция $Y_{\ell 1}$ пропорциональна $\exp(i\varphi)P_{\ell 1}$).

Комбинация в скобках в (8.94) может быть выражена через единичный вектор $\vec{\nu}$ нормали к *плоскости рассеяния* образованной начальным $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$ и рассеянным $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$, волновыми векторами. Вектор \mathbf{n} направлен вдоль оси z . Вектор \mathbf{n}' имеет полярный и азимутальный углы θ и φ . Поэтому

$$\vec{\nu} = \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{n}']}{|[\mathbf{n} \times \mathbf{n}']|} = \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{n}']}{\sin \theta} = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0). \quad (8.95)$$

Тогда находим

$$(\vec{\ell} \cdot \vec{\sigma})P_\ell = i(\sigma_x \sin \varphi - \sigma_y \cos \varphi)(-P_{\ell 1}) = i(\vec{\sigma} \cdot \vec{\nu})P_{\ell 1}. \quad (8.96)$$

Окончательно, амплитуда рассеяния (8.93) записывается в виде

$$\hat{f}(\theta, \varphi) = A(\theta) + B(\theta)(\vec{\nu} \cdot \vec{\sigma}), \quad (8.97)$$

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} \left[(\ell+1)(e^{2i\delta_{\ell}^{(+)}} - 1) + \ell(e^{2i\delta_{\ell}^{(-)}} - 1) \right] P_{\ell}(\cos \theta), \quad (8.98)$$

$$B(\theta) = \frac{1}{2k} \sum_{\ell} \left[e^{2i\delta_{\ell}^{(+)}} - e^{2i\delta_{\ell}^{(-)}} \right] P_{\ell 1}(\theta). \quad (8.99)$$

Вид амплитуды (8.97) единственный, который допускается общими требованиями симметрии. Действительно, из-за сохранения полного момента и чётности, \hat{f} может зависеть только от *скаляров* (не псевдоскаляров) $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \cos \theta$ и $(\vec{\nu} \cdot \vec{\sigma})$ так как $\vec{\nu}$ есть единственный *аксиальный* вектор построенный из полярных векторов \mathbf{n} и \mathbf{n}' . Поскольку для спина $1/2$, все степени операторов спина сводятся к линейным функциям, мы приходим к выражению (8.97).

Азимутальная асимметрия связана только с нормалью $\vec{\nu}$ к плоскости рассеяния. Без спин-орбитальных сил рассеяние не зависит от взаимной ориентации $\vec{\ell}$ и \mathbf{s} . Тогда фазы для двух значений j совпадают и $B(\theta)$ исчезает вместе с азимутальной асимметрией. Амплитуда $A(\theta)$, в выражении (8.98), сводится в этом случае к стандартному выражению (8.8).

8.11 Поляризация и азимутальная асимметрия

Чтобы найти наблюдаемые величины из операторной амплитуды (8.97), мы должны вычислить матричный элемент $f_{\mu'\mu} = \langle \chi_{\mu'} | \hat{f} | \chi_{\mu} \rangle$, который даёт амплитуду рассеяния в направлении $\mathbf{n}'(\theta, \varphi)$ с изменением спиновой проекции $\mu \rightarrow \mu'$. Соответствующее дифференциальное сечение равно

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\mu \rightarrow \mu'} = |f_{\mu'\mu}|^2. \quad (8.100)$$

Если конечная поляризация не измеряется, сечение есть некогерентная сумма по всем возможным μ' ,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\mu} \equiv \sum_{\mu'} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\mu \rightarrow \mu'} = (\hat{f}^{\dagger} \hat{f})_{\mu\mu}, \quad (8.101)$$

где последнее выражение получено для фиксированного начального μ . Таким образом, в этом случае мы должны вычислять среднее значение оператора $\hat{f}^{\dagger} \hat{f}$ по начальному состоянию.

Сумма по начальным и конечным спиновым состояниям в общем случае сводится к вычислению следа в соответствующем пространстве,

$$\sum_{fi} |f_{fi}|^2 = \sum_i \left(\sum_f f_{fi}^* f_{fi} \right) = \sum_i (f^{\dagger} f)_{ii} = \text{Tr}(f^{\dagger} f). \quad (8.102)$$

Для неполяризованного состояния, начальные значения μ равновероятны. Усредняя по ним мы получаем, как и в (8.102),

$$\overline{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\mu} = \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{f}^{\dagger} \hat{f}). \quad (8.103)$$

Для нашего вида амплитуды (8.103), легко найти (следы от матриц Паули равны нулю)

$$\overline{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{unpol}}} = |A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2, \quad (8.104)$$

с отсутствием азимутальной асимметрии.

Для начального пучка с различным числом частиц N_{\pm} с проекцией \pm , мы имеем ненулевую поляризацию \mathbf{P} , см. (8.87). Среднее сечение (8.101) должно вычисляться с учётом этого факта,

$$\overline{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)} = \overline{\langle \hat{f}^{\dagger} \hat{f} \rangle} = |A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2 + 2\text{Re}(A^* B)(\vec{v} \cdot \mathbf{P}). \quad (8.105)$$

Такой эксперимент обнаруживает *азимутальную асимметрию* определяемую начальной поляризацией перпендикулярной к плоскости рассеяния. Стандартный способ представления этого результата – введение коэффициента асимметрии α ,

$$\frac{\overline{d\sigma}}{do} = \overline{\left(\frac{d\sigma}{do}\right)_{\text{unpol}}} \left(1 + \alpha(\vec{\nu} \cdot \mathbf{P})\right), \quad (8.106)$$

$$\alpha = \frac{2\text{Re}(A^*B)}{|A|^2 + |B|^2}. \quad (8.107)$$

Для конечного (рассеянного) пучка мы определяем поляризацию \mathbf{P}' так, чтобы будучи умноженной на плотность рассеянной волны $(\hat{f}^\dagger \hat{f})_{\mu\mu}$ она бы давала средний спин рассеянной волны в единицах $1/2$, как в (8.87),

$$(\hat{f}^\dagger \hat{f})_{\mu\mu} \mathbf{P}' = \langle (\hat{f} \chi_\mu) | \vec{\sigma} | (\hat{f} \chi_\mu) \rangle = (\hat{f}^\dagger \vec{\sigma} \hat{f})_{\mu\mu}, \quad (8.108)$$

или усредняя (черта сверху) по начальному пучку,

$$\mathbf{P}' = \frac{\overline{(\hat{f}^\dagger \vec{\sigma} \hat{f})_{\mu\mu}}}{\overline{(\hat{f}^\dagger \hat{f})_{\mu\mu}}}. \quad (8.109)$$

Поляризация из-за спин-орбитального взаимодействия возникает даже если начальный пучок был неполяризован. Единственный аксиальный вектор в задаче это опять вектор $\vec{\nu}$ нормали к плоскости рассеяния. Поэтому, безо всяких вычислений мы знаем, что в этом случае

$$\mathbf{P}' = \beta \vec{\nu}. \quad (8.110)$$

Простое вычисление среднего по ансамблю неполяризованных спинов в (8.109) определяет коэффициент β ,

$$\beta = \frac{2\text{Re}(A^*B)}{|A|^2 + |B|^2} = \alpha. \quad (8.111)$$

Мы пришли к важному утверждению: *поляризация β начального неполяризованного пучка равна асимметрии α* , (8.106,8.107), в рассеянии поляризованного пучка на той же мишени. Если начальная поляризация \mathbf{P} также присутствует, то результат более громоздкий но он также может быть выведен из (8.109).

| Задача 8.8

Найти в терминах амплитуд A и B , в (8.98) и (8.99), поляризацию \mathbf{P}' полученную в результате рассеяния частиц со спином $1/2$ и начальной поляризацией \mathbf{P} на бесспиновой мишени.

Решение

$$\mathbf{P}' = \frac{2 \operatorname{Re}(A^* B) \vec{\nu} + (|A|^2 - |B|^2) \mathbf{P} + 2|B|^2 \vec{\nu}(\vec{\nu} \cdot \mathbf{P}) - 2 \operatorname{Im}(A^* B) [\vec{\nu} \times \mathbf{P}]}{|A|^2 + |B|^2 + 2 \operatorname{Re}(A^* B)(\vec{\nu} \cdot \mathbf{P})}. \quad (8.112)$$

Глядя на выражения для амплитуды, (8.97 – 8.99), и коэффициенты асимметрии α и поляризации β , мы можем сделать следующее наблюдение: эффекту поляризации и азимутальной асимметрии неполяризованного пучка исчезают в первом борновском приближении. В этом случае фазы рассеяния малы. Используя разложение S -матричных элементов, $\exp(2i\delta) \approx 1 + 2i\delta$, мы видим, что $A(\theta)$ есть действительная величина, а $B(\theta)$ – мнимая, так что $A^* B$ является мнимым и $\alpha = \beta = 0$. Этот результат связан с инвариантностью относительно обращения времени и специфическими особенностями борновского приближения.

Для системы инвариантной относительно обращения времени вероятность процесса не меняется при перемене начального и конечного состояний и изменении знаков всех импульсов и спинов (*детальное равновесие*, которое будет обсуждаться ниже). Амплитуда (8.97) удовлетворяет этому условию. Линейный по $(\vec{\nu} \cdot \vec{\sigma})$ член, который появляется в сечении (8.105) как результат интерференции между нормальной, A , и спин-флиповой, B , амплитудами инвариантен относительно отражения времени. Действительно, поляризация меняет знак, но и вектор нормали $\vec{\nu}$ также меняет знак, потому что при отражении времени $\mathbf{k} \Rightarrow -\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}' \Rightarrow -\mathbf{k}$,

$$\vec{\nu} \sim [\mathbf{k} \times \mathbf{k}'] \Rightarrow [(-\mathbf{k}') \times (-\mathbf{k})] \sim -\vec{\nu}. \quad (8.113)$$

В борновском приближении амплитуда рассеяния мала и поэтому эрмитова. Это следует из условия унитарности (7.61), где можно пренебречь квадратичным членом в правой части. Это видно также прямо из наших выражений (8.97 – 8.99): A действительна при малых фазах, $\vec{\sigma}$ – эрмитовский, $\vec{\nu}$ – меняет знак при транспозиции $\mathbf{n} \leftrightarrow \mathbf{n}'$ но знак восстанавливается при комплексном сопряжении в этом члене поскольку B мнимое при малых фазах. Для эрмитовской амплитуды \hat{f} , вероятность не меняется при простой перестановке начальных и конечных состояний без изменений знаков

импульсов и спинов. Из этих двух инвариантных операций следует инвариантность относительно только изменения знаков импульсов и спинов, без перестановки начального и конечного состояний. Но, из-за симметрии относительно инверсии и вращений, \mathbf{P}' направлена вдоль $\vec{\nu}$, см. (8.110). При изменении знаков спинов и импульсов \mathbf{P}' меняет знак, в то время как $\vec{\nu}$ не меняет. Поэтому $\mathbf{P}' = 0$. Этот результат довольно общий и не ограничивается частицами спина 1/2: всегда в борновском приближении поляризация вначале неполяризованного пучка не появляется.

Поляризация может появиться даже в борновском приближении если эффективный рассеивающий потенциал является *комплексным*. Спин-орбитальный потенциал с мнимой частью ответственной за поглощение частиц в неупругие каналы нарушает эрмитовость амплитуды рассеяния и допускает появление поляризации.

Задача 8.9

Нуклон рассеивается на ядре, которое порождает *комплексный* потенциал $U(r) = (1 + i\xi)V(r)$ (где константа ξ и $V(r)$ действительны) и спин-орбитальный потенциал, который по аналогии с атомной спин-орбитой II.8.1, имеет вид

$$\hat{U}_{ls} = -\eta \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} (\vec{\ell} \cdot \hat{\mathbf{s}}), \quad (8.114)$$

с константой η имеющей размерность квадрата длины. Вычислить в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния неполяризованного пучка и возникающую поляризацию \mathbf{P}' рассеянных частиц.

Решение Сечение даётся выражением

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = |f_B(\theta)|^2 \left(1 + \xi^2 + \frac{1}{4} k^4 \eta^2 \sin^2 \theta \right), \quad (8.115)$$

где $f_B(\theta)$ есть борновская амплитуда для потенциала $V(r)$. Поляризация равна

$$\mathbf{P} = \beta \vec{\nu}, \quad \beta = \frac{k^2 \eta \xi \sin \theta}{1 + \xi^2 + k^4 \eta^2 \sin^2 \theta / 4}. \quad (8.116)$$

Ибо некая наука может быть более полезной, но никакая не имеет такой красоты и прелести в своей полезности. <...>

Роджер Бэкон, *Большое сочинение*

Глава 9

Дополнительные вопросы теории рассеяния

9.1 Классическое и квантовое рассеяние

Как следует из нашего первого обращения, раздел 7.1, к классической картине рассеяния, полное классическое сечение рассеяния,

$$\sigma_{\text{cl}} = \int db \, 2\pi b, \quad (9.1)$$

определяется интегрированием по всем *прицельным параметрам* b , для которых рассеяние имеет место. Если потенциал $U(\mathbf{r})$ не исчезает полностью при $b > b_{\text{max}}$, как это было в задаче 7.1, то полное классическое сечение (9.1) *бесконечно*. Но, *квантовое* упругое сечение,

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\phi \, |f|^2, \quad (9.2)$$

оказывается *конечным*, если потенциал падает на больших расстояниях быстрее, чем $1/r^2$.

Классическое рассмотрение может стать несправедливым на больших прицельных параметрах из-за того, что большим расстояниям соответствуют малые углы рассеяния θ . А для того, чтобы использовать классическую картину, угол отклонения θ должен превышать квантовую неопределённость $\Delta\theta$ направления траектории. В этом же смысле, неопределённость Δb прицельного параметра должна быть мала по сравнению с величиной b . Малый классический угол отклонения θ может быть оценен через компоненту импульса p_{\perp} перпендикулярную начальному направлению движения,

$$\theta \sim \frac{p_{\perp}}{p} \sim \frac{F_{\perp} \Delta t}{p}, \quad (9.3)$$

где $F_{\perp} \sim (\partial U / \partial b) \sim U(b)/b$ – поперечная сила ответственная за изгиб траектории и $\Delta t \sim b/v$ – характерное время взаимодействия, v – относительная скорость. Отсюда

$$\theta \sim \frac{\partial U}{\partial b} \frac{\Delta t}{p} \sim \frac{U(b)}{b} \frac{b}{pv} \sim \frac{U(b)}{pv} \sim \frac{U(b)}{E}. \quad (9.4)$$

С другой стороны, переходя на квантовый язык, неопределённость прицельного параметра, Δb , влечёт неопределённость поперечной компоненты импульса, $\Delta p_{\perp} \sim \hbar / \Delta b$. Это эквивалентно неопределённости в угле рассеяния,

$$\Delta \theta \sim \frac{\Delta p_{\perp}}{p} \sim \frac{\hbar}{(\Delta b)p}. \quad (9.5)$$

Условия

$$\Delta \theta \ll \theta, \quad \Delta b \ll b \quad (9.6)$$

определяют пределы классического описания рассеяния,

$$\theta \gg \Delta \theta \sim \frac{\hbar}{p \Delta b} \gg \frac{\hbar}{pb} \rightsquigarrow \frac{U(b)}{E} \gg \frac{\hbar}{pb}. \quad (9.7)$$

Если потенциал $U(b)$ убывает на больших расстояниях *быстрее*, чем кулоновский ($\sim 1/b$), неравенство (9.7) нарушается на больших b . В этом случае малые углы рассеяния полностью определяются квантово-механической дифракцией. В чисто кулоновском случае рассеяния заряда e на центре с зарядом Ze , угол рассеяния $\theta \sim Ze^2/pvb$, и условие классичности (9.7) выполняется для всех b при достаточно большой величине параметра Зоммерфельда,

$$\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v} \gg 1. \quad (9.8)$$

Обратное неравенство требуется для справедливости квантово-механической теории возмущений 5.64).

9.2 Квазиклассическая амплитуда

Квазиклассическое приближение может работать когда *много* парциальных волн дают заметный вклад в упругое сечение и дискретность квантованного орбитального момента становится менее существенной. Это

возможно только при достаточно большой энергии. Для не слишком малых углов рассеяния можно ожидать, что квазиклассическое приближение будет переходить в классическую теорию. Как обсуждалось выше, в (9.5), угол рассеяния θ должен превышать $\hbar/(pb) \sim 1/\ell$, что эквивалентно требованию

$$\ell\theta \gg 1. \quad (9.9)$$

Поскольку полином Лежандра $P_\ell(\cos \theta)$ имеет ℓ нулей, область углов в (9.9) должна превышать угловой размер $\sim 1/\ell$ между нулями, что ведёт к классическому усреднению. Квазиклассическое приближение может быть справедливо в широком интервале углов, а с некоторыми улучшениями, может описать и дифракционные эффекты.

Квазиклассические фазы могут быть найдены путем прямого сравнения волновых функций для данного рассеивающего потенциала и для свободного движения. Эти фазы в классически разрешенной области за точкой поворота R_ℓ , где классический импульс $p_\ell(r)$ исчезает, были найдены в (II.2.58),

$$\Phi_\ell(r) = \frac{1}{\hbar} \int_{R_\ell}^r dr p_\ell(r) + \frac{\pi}{4}. \quad (9.10)$$

Здесь

$$p_\ell(r) = \sqrt{2m[E - U(r)] - \frac{\hbar^2(\ell + 1/2)^2}{r^2}}, \quad (9.11)$$

и $p_\ell(R_\ell) = 0$. Квазиклассическая фаза Φ_ℓ° для свободного движения даётся таким же выражением с $U = 0$,

$$\Phi_\ell^\circ(r) = \frac{1}{\hbar} \int_{R_\ell^\circ}^r dr p_\ell^\circ(r) + \frac{\pi}{4}, \quad (9.12)$$

$$p_\ell^\circ(r) = \sqrt{2mE - \frac{\hbar^2(\ell + 1/2)^2}{r^2}}, \quad p_\ell^\circ(R_\ell^\circ) = 0. \quad (9.13)$$

Тогда, частичная фаза рассеяния равна

$$\delta_\ell = \left(\Phi_\ell - \Phi_\ell^\circ \right)_{r \rightarrow \infty}. \quad (9.14)$$

Фазы определяют амплитуду рассеяния

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) (e^{2i\delta_\ell} - 1). \quad (9.15)$$

Для углов $\theta \neq 0$, часть в (9.15), которая не содержит $\exp(2i\delta_\ell)$ исчезает (см. (II.1.146)), так что

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) e^{2i\delta_{\ell}}, \quad \theta \neq 0. \quad (9.16)$$

В квазиклассической области (9.9), полиномы Лежандра также могут быть представлены их квазиклассическим пределом *задача II.1.17*,

$$P_{\ell}(\cos \theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \ell \sin \theta}} \sin[\theta(\ell + 1/2) + \pi/4]. \quad (9.17)$$

Окончательно, квазиклассическая амплитуда рассеяния становится

$$f(\theta) \approx \frac{1}{ik} \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta}} \sum_{\ell} \sqrt{\ell} e^{2i\delta_{\ell}} \sin[\theta(\ell + 1/2) + \pi/4]. \quad (9.18)$$

9.3 Квазиклассические фазы

Как всегда, в предельном переходе от квантового к классическому режиму существенный вклад в сумму в (9.18) дают много парциальных волн с большими ℓ . Эти вклады деструктивно интерферируют имея быстро меняющиеся фазы. В этом случае классическая траектория выделена условием стационарности фаз, см. раздел I.15.4: фазы должны слабо меняться между близкими значениями ℓ .

Соседние парциальные волны складываются конструктивно если

$$\frac{d}{d\ell} [2\delta_{\ell} \pm \theta(\ell + 1/2)] = 2 \frac{d\delta_{\ell}}{d\ell} \pm \theta = 0. \quad (9.19)$$

Точка поворота для свободного движения равна, в согласии с классической картиной,

$$R_{\ell}^{\circ} = \frac{\hbar(\ell + 1/2)}{\sqrt{2mE}} = \frac{\ell + 1/2}{k}, \quad (9.20)$$

и прямым интегрированием мы находим из (9.12), что при $r \gg R_{\ell}^{\circ}$, фазы равны точному результату (II.2.80) для свободного движения,

$$\Phi_{\ell}^{\circ}(r) = kr - \frac{\ell\pi}{2}. \quad (9.21)$$

Правильный результат здесь обязан замене $\ell(\ell + 1) \rightarrow (\ell + 1/2)^2$, *задача II.2.4*.

Таким образом, парциальные фазы рассеяния в квазиклассическом приближении даются

$$\delta_\ell = \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{R_\ell}^r dr p_\ell(r) + \frac{\pi}{4} - kr + \frac{\ell\pi}{2} \right\}. \quad (9.22)$$

Члены расходящиеся при $r \rightarrow \infty$ очевидно сокращаются. Условие стационарности (9.19) даёт

$$- \int_{R_\ell}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \frac{\hbar(2\ell+1)}{p_\ell(r)} + \pi \pm \theta = 0. \quad (9.23)$$

Вводя классические переменные – прицельный параметр b и скорость velocity v на бесконечности,

$$b = R_\ell^\circ = \frac{\hbar(\ell+1/2)}{mv}, \quad v = \sqrt{\frac{2E}{m}}, \quad (9.24)$$

мы получаем из (9.23)

$$-2b \int_{R(b)}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \frac{1}{\sqrt{1 - (U(r)/E) - (b/r)^2}} \pm \theta = 0. \quad (9.25)$$

Это есть не что иное, как классическое уравнение [20], § 18, определяющее угол рассеяния, как функцию прицельного параметра.

Задача 9.1

Найти квазиклассическую фазу предполагая, что потенциал $U(r)$ быстро убывает как функция расстояния так, что он мал вблизи точки поворота данной парциальной волны

Решение Разность фаз (9.14) может быть разложена до первого порядка по потенциалу,

$$\delta_\ell \approx - \int_{R_\ell^\circ}^{\infty} dr U(r) \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dE} p_\ell^\circ(r) = - \frac{m}{\hbar^2} \int_{R_\ell^\circ}^{\infty} dr \frac{U(r)}{\sqrt{k^2 - (\ell+1/2)^2/r^2}}. \quad (9.26)$$

Поскольку сходимость разложения по парциальным волнам определяется волнами с $\ell \gg 1$, для короткодействующих потенциалов можно вычислять фазы с помощью выражения (9.26). Можно показать [23], § 123, что фазы (9.26) конечны, если потенциал $U(r)$ убывает с расстоянием быстрее, чем кулоновский потенциал $\sim 1/r$; полное сечение конечно для потенциалов

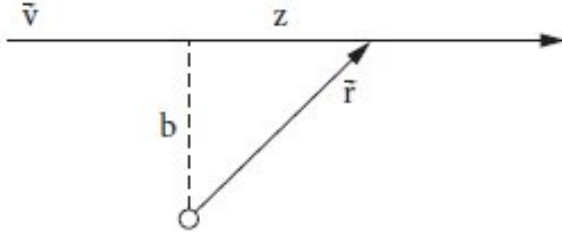


Рис. 9.1. Приближение прямолинейной траектории.

спадающих быстрее, чем $1/r^2$; амплитуда рассеяния вперёд конечна для потенциалов спадающих быстрее, чем $1/r^3$.

Согласно (9.26), при больших l имеем по порядку величины

$$\delta_\ell \approx -\frac{mU(R_\ell^o)R_\ell^o}{\hbar^2 k} \approx -\frac{mb}{k\hbar^2} U(b). \quad (9.27)$$

Эта оценка может быть также переписана как

$$\delta_\ell \approx \frac{\tau}{\hbar} U(b), \quad (9.28)$$

где $\tau \sim b/v$ – типичное время соударения. Чтобы сделать эту оценку более точной, что расстояние наибольшего сближения R_ℓ^o при свободном движении совпадает с прицельным параметром b и используя координату $z = \sqrt{r^2 - b^2}$ движения вдоль невозмущённой классической траектории, получаем из (9.26)

$$\delta(b) \approx -\frac{m}{k\hbar^2} \int_b^\infty dr \frac{U(r)}{\sqrt{1 - (b/r)^2}} = -\frac{m}{k\hbar^2} \int_b^\infty dz U(\sqrt{b^2 + z^2}). \quad (9.29)$$

Это приближение прямолинейной траектории (сравни с (7.104)) подразумевалось при выводе (9.26).

Теперь мы можем перейти к интегрированию по времени полагая $t = 0$ в момент наибольшего сближения; тогда $z = vt = (\hbar k/m)t$, и

$$\delta(b) \approx -\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dt U(\sqrt{b^2 + v^2 t^2}) = -\frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^\infty dt U(\sqrt{b^2 + v^2 t^2}), \quad (9.30)$$

в соответствии с оценкой (9.28). В этом приближении полный сдвиг фазы $2\delta_\ell = 2\delta(b)$, $b = (l + 1/2)/k$, равен интегралу (делённому на \hbar) от взаимодействия вдоль невозмущённой прямолинейной траектории. Приближение

(9.26) справедливо только для слабых потенциалов, т.е. для *малых* углов рассеяния $\theta \ll 1$ (прямая траектория) но достаточно больших ℓ таких, чтобы $\ell\theta > 1$.

Задача 9.2

Вывести (9.26) из борновского приближения (8.55).

Решение Удобно использовать цилиндрическую систему координат с осью z вдоль вектора $\mathbf{k}' + \mathbf{k}$, который ортогонален к $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Вектор \mathbf{r} имеет z -компоненту вдоль оси и \mathbf{b} в поперечной плоскости (xy) , тогда $r^2 = z^2 + b^2$. Если $q = q_x$, то

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = (\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}) = qb \cos \varphi = 2kb \sin \frac{\theta}{2} \cos \varphi, \quad (9.31)$$

и борновская амплитуда принимает вид

$$f_B(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty b db \int_{-\infty}^\infty dz U(\sqrt{b^2 + z^2}) e^{-i2kb \sin(\theta/2) \cos \varphi}. \quad (9.32)$$

Интеграл по φ даёт функцию Бесселя,

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i2kb \sin(\theta/2) \cos \varphi} = 2\pi J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (9.33)$$

Но для малых θ , как следует из сравнения уравнения (II.1.155) с уравнением Бесселя,

$$J_0((\ell + 1/2)\theta) \approx P_\ell(\cos \theta). \quad (9.34)$$

С той же точностью, $2 \sin(\theta/2) \approx \theta$, и $\ell + 1/2 = kb$. Вводя ℓ и r в качестве новых переменных интегрирования, мы получаем

$$f_B(\theta) \approx -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \ell d\ell \int_{R_\ell^c}^\infty dr \frac{rU(r)}{\sqrt{r^2 - (\ell + 1/2)^2/k^2}} P_\ell(\cos \theta). \quad (9.35)$$

Это совпадает с точным парциально волновым разложением, в котором фазы считаются малыми ($\sin \delta_\ell \approx \delta_\ell$) и взяты из квазиклассики (9.26), а сумма по парциальным волнам заменена на интеграл, $\sum_\ell (2\ell + 1) \rightarrow 2 \int \ell d\ell$, поскольку в этом пределе дают вклад много парциальных волн.

9.4 Связь с приближением эйконала

Последняя задача указывает путь к улучшению приближения для того, чтобы учесть дифракционные эффекты и обеспечить выполнение оптической теоремы.

Как и раньше, мы предполагаем, существенны вклады многих парциальных волн и что *энергия велика* по сравнению с потенциалом \bar{U} с типичным радиусом действия R ,

$$|\bar{U}| \ll E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mR^2} k^2 R^2 \sim \bar{K}(kR)^2. \quad (9.36)$$

Здесь условие применимости борновского приближения, раздел (7.11), может быть нарушено на углы рассеяния малы и мы можем использовать приближение (9.34), так что

$$f(\theta) \approx \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(e^{2i\delta_{\ell}} - 1) J_0(2kb_{\ell} \sin(\theta/2)), \quad kb_{\ell} = \ell + \frac{1}{2}. \quad (9.37)$$

Переходя от суммирования по ℓ к интегрированию по прицельному параметру, находим

$$f(\theta) = -ik \int_0^{\infty} b db (e^{2i\delta(b)} - 1) J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (9.38)$$

Если бы мы сделали разложение для малых фаз, $\exp[2i\delta(b)] \approx 1 + 2i\delta(b)$, и взяли бы фазы вдоль прямой траектории (9.29), мы бы вернулись к борновскому приближению, (9.32-9.34).

Эйкональное приближение (приближение прицельного параметра), введённое ранее в разделе 7.12 путём прямого решения волнового уравнения, использует выражение (9.38) без разложения в показателе экспоненты. Записывая функцию Бесселя в (9.38) как интеграл (9.33), мы получаем выражение (7.100),

$$f(\theta) = -\frac{ik}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} b db (e^{2i\delta(b)} - 1) e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{b})}, \quad \mathbf{b} = (b \cos \varphi, b \sin \varphi, 0). \quad (9.39)$$

Здесь фазы $\delta(b)$ могут быть вычислены согласно (9.29).

Задача 9.3

Проверить, что амплитуда (9.39) удовлетворяет оптической теореме, см. раздел 7.8, для произвольных действительных фаз $\delta(b)$.

Решение Действительно, полное упругое сечение, после интегрирования $|f|^2$ по d^2q , которое даёт двумерную $\delta^{(2)}(\mathbf{b} - \mathbf{b}')$, равно

$$\sigma_{\text{el}} = \int d^2b \, 2[1 - \cos(2\delta(b))] = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0). \quad (9.40)$$

Эти результаты будут служить отправной точкой для рассмотрения дифракционного рассеяния. Они также могут быть обобщены на нецентрального поле. Метод работает также и в присутствии неупругих каналов, но с *комплексными* фазами $\delta(b)$, когда $|S_\ell| = |\exp[2i\delta(b)]| < 1$.

9.5 Дифракционное рассеяние

Наличие неупругих процессов может быть первоначально обнаружено как *поглощение* из-за его влияния на упругое рассеяние. Мы уже видели, см. раздел 7.2, что поглощение и упругое рассеяние определяются через те же самые параметры, элементы S -матрицы. Поглощение обрезаёт или уменьшает некоторые части фронта волны. В то же время упруго рассеянная волна неизбежно искажена. Искражённая волна больше не плоская волна, она содержит Фурье-компоненты с волновыми векторами отличными от волновых векторов падающего пучка.

Дополнительное рассеяние с длиной волны λ малой по сравнению с радиусом R потенциала аналогична дифракции света на препятствии. Квантовая теория дифракционного рассеяния практически совпадает с описанием дифракции параллельного коротковолнового луча идущего от удаленного источника (*дифракция Фраунгофера*, [11], § 61). Многие формулы могут быть непосредственно взяты из оптики.

Одно из типичных приложений дифракционной картины можно найти в задаче рассеяния достаточно быстрых частиц на ядрах. Условие $\lambda < R$, где R есть размер ядра, выполняется для нейтронов с энергией выше, чем несколько десятков МэВ. Строго говоря, квантовая система, такая, как атомное ядро, не имеет четкой границы. В более точном рассмотрении нужно учитывать гладкое поведение ядерной плотности которая падает от среднего значения в центре к нулю.

Сделаем простые оценки для быстрых нейтронов взаимодействующих с тяжелым ядра. Если размер системы гораздо больше, чем длина волны нейтронов, нейтроны видят отдельные составляющие внутри ядра, и мы можем использовать понятие многократных столкновений в среде. *Длина*

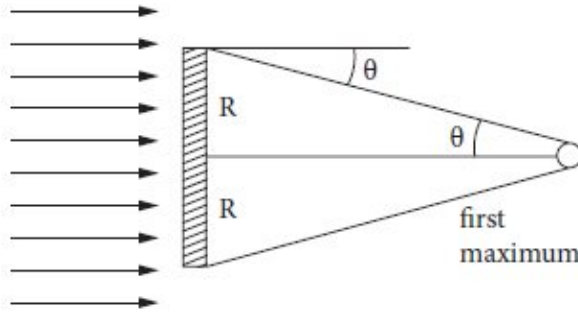


Рис. 9.2. Дифракционная картина на чёрном диске.

свободного пробега нейтронов в ядерной материи оценивается как

$$\Lambda \approx \frac{1}{n\sigma}, \quad (9.41)$$

где n есть плотность частиц в ядерной среде ($\sim 10^{38} \text{ см}^{-3}$, как это можно извлечь из плотности в центре тяжёлых ядер) а σ есть типичное сечение рассеяния. Для неё мы можем взять экспериментальное значение сечения рассеяния свободных нуклонов с кинетической энергией в системе центра масс порядка нескольких десятков МэВ, $\sigma \approx 0.5$ барн ($1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$). Отсюда мы находим $\Lambda \approx 2 \cdot 10^{-14} \text{ см}$. Ядерная плотность, грубо говоря, не зависит от массового числа A , поскольку тяжёлое ядро подобно капле несжимаемой жидкости, объём которой V пропорционален A , и для сферического ядра,

$$V = \frac{4}{3} \pi R^3 \rightsquigarrow R = r_0 A^{1/3}, \quad r_0 \approx 1.2 \text{ fm}. \quad (9.42)$$

Так как даже для относительно легких ядер мы имеем $\Lambda \ll R$, вероятность для нуклона пройти ядро без столкновения ничтожно мала, $\sim 10^{-8}$. Поэтому мы можем естественно принять, что в этой области энергий, ядро ведёт себя как *чёрная сфера*, которая поглощает (отнимает от падающего пучка) все частицы попадающие внутрь прицельного параметра $b \sim R$.

Мы пришли к задаче о дифракции коротких волн, $kR \gg 1$, на чёрной сфере. Если мы смотрим на упруго рассеянные частицы, мы видим, небольшие отклонения от классических траекторий, которые соответствовали бы геометрической оптике. Однако, в отличие от оптики, где наблюдаемые эффекты действительно малы для малых углов дифракции Фраунгофера, в ядерной физике они полностью определяют экспериментальную картину.

Например, рассмотрим дифракцию на черном круге радиуса R , рис. 9.2. Дифракционный угол ϑ определяется из условия $\bar{\lambda} \sim R \sin \vartheta$, и при наших условиях он мал, $\vartheta \sim \bar{\lambda}/R \ll 1$. Сразу позади диска мы видим геометрическую *тень*. Дифракционная картина начинается только на расстоянии первого максимума, которое порядка

$$R \cot \vartheta \sim \frac{R}{\vartheta} \sim \frac{R^2}{\bar{\lambda}} \gg R. \quad (9.43)$$

Мы уже видели, *задача 7.3*, что это расстояние определяет возможность асимптотического разделения падающей и рассеянной волн, которое необходимо для разложения по парциальным волнам. В оптике мы имеем $\bar{\lambda} \sim 10^{-5}$ см, $R \sim 1$ см, $R^2/\bar{\lambda} \sim 1$ км, в то время как наблюдение ведётся на расстоянии $r \ll R^2/\bar{\lambda}$. В противоположность этому, в ядерной физике $R \leq 10^{-12}$ см, $\bar{\lambda} \geq 10^{-(13 \div 14)}$ см, $R^2/\bar{\lambda} \sim 10^{-(10 \div 11)}$ м, в то время, как наблюдение ведётся на макроскопических расстояниях $r \gg R^2/\bar{\lambda}$.

9.6 Дифракция на чёрной сфере

В коротковолновом пределе, который мы здесь рассматриваем, в сечение дают вклад много парциальных волн. Сечение поглощения,

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(1 - |S_{\ell}|^2), \quad (9.44)$$

выражается через *коэффициенты прилипания*,

$$\zeta_{\ell} = 1 - |S_{\ell}|^2, \quad 0 \leq \zeta_{\ell} \leq 1. \quad (9.45)$$

Окончательное выражение,

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)\zeta_{\ell}, \quad (9.46)$$

имеет простой смысл: вклад парциальной волны есть вероятность захвата частицы (дефицит унитарности S -матрицы для данного ℓ), ζ_{ℓ} , умноженный на соответствующую площадь $\pi(b_{\ell+1}^2 - b_{\ell}^2) = (\pi/k^2)(2\ell + 1)$.

Коэффициенты прилипания ζ_{ℓ} определяют *черноту* рассеивателя. Для абсолютно чёрного препятствия, все частицы поглощаются как только они попадают в площадь препятствия,

$$\zeta_{\ell} = \begin{cases} 1, & b < R, \quad \text{i.e. } \ell \leq kR; \\ 0, & b > R, \quad \text{i.e. } \ell > kR. \end{cases} \quad (9.47)$$

Таким образом, элементы S -матрицы равны

$$S_\ell = e^{2i\delta(b_\ell)} = \begin{cases} 0, & \ell \leq kR; \\ 1, & \ell > kR, \end{cases} \quad (9.48)$$

и интегрирование в *упругой* амплитуде (9.38) обрезается на радиусе сферы,

$$f(\theta) = ik \int_0^R db b J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (9.49)$$

Необходимо подчеркнуть опять, что всё рассмотрение законно только в коротковолновом пределе, когда небольшие ошибки в предельном прицельном параметре не играют роли из-за многих парциальных волн дающих вклад в сечение.

Интегрирование в (9.49) даёт

$$f(\theta) = i \frac{R}{2 \sin(\theta/2)} J_1(2kR \sin(\theta/2)), \quad (9.50)$$

и мы находим дифференциальное упругое сечение

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = R^2 \frac{J_1^2(2kR \sin(\theta/2))}{4 \sin^2(\theta/2)} \equiv k^2 R^4 \frac{J_1^2(x)}{x^2}, \quad x = 2kR \sin(\theta/2). \quad (9.51)$$

При больших x , $x \gg 1$, функция Бесселя имеет асимптотику

$$J_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right), \quad (9.52)$$

так что для достаточно больших углов рассеяния, $2 \sin(\theta/2) \gg (1/kR) = \bar{\lambda}/R$, сечение (9.51) падает как $\sim 1/x^3$. Это в точности есть утверждение, что дифракционные углы малы,

$$2 \sin(\theta/2) \approx \theta \leq \frac{1}{kR} = \frac{\bar{\lambda}}{R} \ll 1. \quad (9.53)$$

В этом режиме,

$$\frac{d\sigma}{d\theta} \approx R^2 \frac{J_1^2(kR\theta)}{\theta^2}, \quad (9.54)$$

в то время как для очень малых углов, $\theta \ll 1/kR$, мы имеем $J_1(x) \rightarrow x/2$, и сечение стремится к своему предельному значению.

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{k^2 R^4}{4} = (kR)^2 \frac{R^2}{4}. \quad (9.55)$$

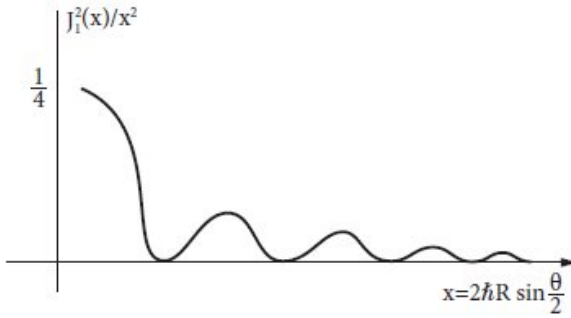


Рис. 9.3. Угловое распределение для чёрного диска.

Угловое распределение, рис. 9.3, демонстрирует характерные особенности дифракционного рассеяния. Сечение имеет острый пик вперёд, $\theta < 1/kR$; при больших углах присутствуют вторичные максимумы с периодичностью по углу, определяемой фактором kR . Интенсивность вторичных максимумов быстро убывает $\sim 1/\theta^3$.

Полное упругое сечение,

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\theta \frac{d\sigma}{d\theta} = 2\pi R^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{J_1^2(2kR \sin(\theta/2))}{4 \sin^2(\theta/2)}, \quad (9.56)$$

может быть вычислено с достаточной точностью предполагая, что можно предел интегрирования устремить к бесконечности, поскольку в любом случае главный вклад дают малые углы. Тогда мы получаем

$$\sigma_{\text{el}} \approx 2\pi R^2 \int_0^\pi d\theta \theta \frac{J_1^2(kR\theta)}{\theta^2} \approx 2\pi R^2 \int_0^\infty dx \frac{J_1^2(x)}{x} = \pi R^2. \quad (9.57)$$

Как и в классической теории, в этом дифракционном пределе упругое сечение равно геометрическому сечению чёрной сферы.

Задача 9.4

Показать, что в пределе (9.53), сечение *поглощения* (9.46) также равно этому классическому результату,

$$\sigma_{\text{inel}} = \pi(R + \bar{\lambda})^2 \approx \pi R^2 = \sigma_{\text{el}}, \quad (9.58)$$

и проверить, что выполняется оптическая теорема.

9.7 Оптическая модель

Обычно среда не может считаться абсолютно чёрной (как предполагалось выше). Например, если бы сложное ядро было бы чёрным, сечения (9.57) и (9.58) росли бы монотонно с массовым числом $\propto R^2 \propto A^{2/3}$ и не зависели бы от энергии в пределе $kR \gg 1$. Эксперименты противоречат такому предположению; угловые распределения рассеянных нейтронов также отличаются от предсказаний чисто дифракционной модели.

Во многих случаях лучше рассматривать мишень как *серую* или полупрозрачную. Дифракционное рассеяние в таких случаях может быть описано *оптической моделью*, путём введения *комплексного потенциала*. Параметры оптического потенциала трудно рассчитать теоретически. Как правило, эти параметры устанавливаются эмпирически и зависят от энергии рассеянных частицы. Для нейтронов, рассеянных на ядрах, мнимая часть оптического потенциала не очень большая, $\text{Im } U \approx 5 - 6$ МэВ при энергии $E \sim 10$ МэВ, в то время как реальная часть потенциала (глубина эффективной потенциальной ямы) порядка 40-50 МэВ.

Оценим длину свободного пробега нейтрона Λ в такой среде. Поскольку $kR > 1$, можно пренебречь кривизной ядерной поверхности и провести оценку для нейтрона пересекающего плоскую границу между двумя средами. Внутри поглощающего ядра волновой вектор нейтрона является комплексным, $\mathbf{K} = \mathbf{K}_1 + i\mathbf{K}_2$, и волновая функция спадает внутри ядра,

$$\psi(\mathbf{r}) \propto e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})} = e^{-(\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r}) + i(\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{r})}. \quad (9.59)$$

Комплексный волновой вектор выражен через комплексный потенциал,

$$\hbar K = \sqrt{2m(E - U)}, \quad U = -U_1 - iU_2, \quad (9.60)$$

где $U_1 > 0$ (ядерное притяжение) и $U_2 > 0$ (затухание волны).

Если, согласно приведённым выше цифрам, U_2 значительно меньше, чем U_1 , мы получаем приближённые выражения:

$$K_1 = \text{Re } K \approx \sqrt{\frac{2m(E + U_1)}{\hbar^2}} = k \sqrt{1 + \frac{U_1}{E}}, \quad (9.61)$$

$$K_2 = \text{Im } K \approx \frac{2mU_2}{2\hbar \sqrt{2m(E + U_1)}} = k \frac{U_2}{E} \frac{1}{1 + U_1/E}. \quad (9.62)$$

Интенсивность волны (9.59) падает экспоненциально,

$$|\psi|^2 \propto e^{-2(\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r})}, \quad (9.63)$$

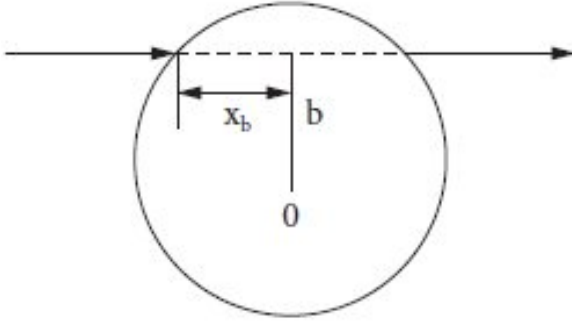


Рис. 9.4. Рассеяние быстрой частицы на сером шаре.

и длина свободного пробега может быть оценена как

$$\Lambda \approx \frac{1}{2K_2} = \frac{1}{2k} \frac{E}{U_2} \sqrt{1 + \frac{U_1}{E}}. \quad (9.64)$$

Для упомянутых выше значений U_1, U_2 и E , находим $\Lambda \approx 0.6 \cdot 10^{-12}$ см, т.е. значительно больше, чем наша предыдущая оценка (9.41). Как мы увидим далее, из-за принципа Паули внутренние столкновения подавлены, поскольку часть доступных конечных состояний уже занято нуклонами и фазовый объём конечных состояний достижимых в столкновении сильно уменьшается.

Используя оптическую аналогию, мы можем ввести комплексный *показатель преломления* серой среды,

$$n = n_1 + in_2 = \frac{K}{k} = \frac{K_1 + iK_2}{k}. \quad (9.65)$$

Предположим для простоты, что ядерный потенциал U моделируется сферической ямой радиуса R . Быстрые нейтроны с $kR \gg 1$ не чувствуют кривизны поверхности. Пусть $2x_\ell$ – длина пути пересечения ядра быстрым нейтроном с орбитальным моментом ℓ (прицельный параметр $b = \ell/k$), рис. 9.4. Прошедшая волна отличается от падающей на фазу

$$\Delta\varphi = (K_1 - k)2x_\ell = k(n_1 - 1)2x_\ell, \quad (9.66)$$

и подавлена по амплитуде на фактор $\exp(-K_2 \cdot 2x_\ell) = \exp(-2n_2 k x_\ell)$. Так же как в (9.48), мы находим элементы S -матрицы,

$$S_\ell = \begin{cases} \exp\{-2x_\ell[n_2 - i(n_1 - 1)]k\}, & \ell \leq kR; \\ 1, & \ell > kR. \end{cases} \quad (9.67)$$

Как и раньше, главный вклад в рассеяние идёт от больших значений ℓ . Общее выражение (9.38) даёт $x(b) = \sqrt{R^2 - b^2}$

$$f(\theta) = ik \int_0^R b db \left(1 - e^{-2kx(b)[n_2 - i(n_1 - 1)]}\right) J_0(2kb \sin(\theta/2)). \quad (9.68)$$

Задача 9.5

Вычислить упругое рассеяние и сечение поглощения.

Решение Интегрирование по углам даёт

$$\sigma_{\text{el}} = 2\pi \int_0^R b db \left|1 - e^{-2k\sqrt{R^2 - b^2}[n_2 - i(n_1 - 1)]}\right|^2, \quad (9.69)$$

$$\sigma_{\text{inel}} = 2\pi \int_0^R b db \left[1 - e^{-4n_2 k \sqrt{R^2 - b^2}}\right]. \quad (9.70)$$

После последующего интегрирования по x с $x dx = b db$, мы получаем, например для сечения поглощения,

$$\sigma_{\text{inel}} = \pi R^2 + 2\pi \frac{e^{-\alpha R}(1 + \alpha R) - 1}{\alpha^2}, \quad \alpha = 4n_2 k. \quad (9.71)$$

В пределе слабого поглощения, $\alpha R \ll 1$, результат пропорционален объёму,

$$\sigma_{\text{inel}} \approx \frac{2\pi}{3} \alpha R^3 = \frac{\alpha}{2} V. \quad (9.72)$$

В практических вычислениях нужно учитывать диффузность ядерной границы, разницу в формах реальной и мнимой частей оптического потенциала (поглощение сильнее вблизи поверхности), спин-орбитальное взаимодействие и т.д. Гипотеза о резкой границе переоценивает отношение $\sigma_{\text{el}}/\sigma_{\text{inel}}$ из-за усиленного отражения от скачка показателя преломления. Введение плавного изменения оптического потенциала уменьшает это отношение в согласии с наблюдениями, что есть аналог *просветлённой оптики*. Новые аспекты возникают в приложениях оптической модели к *заряженным* частицам. Здесь рассеяние аналогично дифракции света на сфере с показателем преломления $n \propto (1 - \text{const}/r)$, преломление отклоняет лучи от сферы и искажает область тени.

9.8 Многократное рассеяние в среде

Здесь мы кратко коснемся очень важного приложения – рассеяния частицы в среде, которая содержит множество рассеивателей. Мы предполагаем, хаотическое распределение этих центров, например атомов в жидкости или примесей в неупорядоченных твердых веществах. Типичное применение можно найти в нейтронной физике, в конденсированных средах длина волны медленных нейтронов может быть порядка межатомных расстояний, а в газах это расстояние превышает длину волны.

Рассмотрим случай короткодействующих потенциалов, когда сила действует только на расстоянии небольшом по сравнению со средним расстоянием между рассеивателями. Вследствие многократного рассеяния, интерференция волн, рассеянных от различных центров, и волны, рассеянной вперед, с падающей волной приводит к отражению и преломлению сигнала проходящего через среду. Мы начнем с рассеяния плоской волны $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$ на одном центре расположенном в начале координат. Обратное фурье-преобразование выражения (7.74) определяет

$$U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \int d^3k' \frac{1}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}. \quad (9.73)$$

Отметим, что правая часть уравнения (9.73) содержит интегрирование по всем векторам \mathbf{k}' в то время как амплитуда упругого рассеяния определена только на энергетической поверхности $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$. Поэтому, (9.73) есть определение амплитуды *вне массовой поверхности*, которая совпадает с обычной упругой амплитудой на энергетической поверхности. Сравнение (9.73) с уравнением Шрёдингера даёт

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi^2} \int d^3k' f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})}. \quad (9.74)$$

Задача 9.6

Вывести уравнение аналогичное (9.74) для волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0)$, которая описывает рассеяние плоской волны с волновым вектором \mathbf{k} центром расположенным в точке \mathbf{r}_0 .

Решение

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) = -\frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0)}}{2\pi^2} \int d^3k' f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)}. \quad (9.75)$$

Правая часть уравнения (9.75) описывает однократное действие оператора рассеяния локализованного в точке \mathbf{r}_0 ,

$$\hat{f}(\mathbf{r}_0) \Rightarrow f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_0}. \quad (9.76)$$

Переходя к системе N рассеивателей расположенных в точках $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \{\mathbf{r}_i\})$, мы должны найти конечную волновую функцию $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \{\mathbf{r}_i\})$ после многократного рассеяния падающей волны с волновым вектором \mathbf{k} . Для данного рассеивателя в точке \mathbf{r}_a , Эффективной падающей волной, вместо плоской волны в (9.76), является функция $\psi_{\mathbf{k}}^{(a)}(\mathbf{r}; \{\mathbf{r}_i\})$, которая учитывает присутствие всех других рассеивателей. После суммирования волн рассеянных на всех центрах мы получаем, вместо (9.75) и (9.76),

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = -\frac{1}{2\pi^2} \int d^3 k' f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \sum_a e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_a} \psi_{\mathbf{k}'}^{(a)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (9.77)$$

Поскольку мы имеем много центров рассеивания, влияние каждого одного из них на процесс рассеяния мало, $\sim 1/N$. В сумме по a в (9.77), в хорошем приближении можно заменить функцию $\psi_{\mathbf{k}}^{(a)}$ на полную волновую функцию $\psi_{\mathbf{k}}$. После этого мы можем усреднить (9.77) по всему хаотическому распределению центров в объёме V с ограничением, что их средняя плотность $\rho = N/V$ фиксирована. В предположении короткодействующих сил, рассеяние на данном центре не зависит от точного положения других центров, так что в правой части (9.77) можно усреднять независимо фазу экспоненты и волновую функцию ψ независимо. Усреднённая функция $\overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}$ подчиняется тогда уравнению

$$(\nabla^2 + k^2) \overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})} = -\frac{1}{2\pi^2} \sum_a \overline{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_a} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})}. \quad (9.78)$$

Суммирование по рассеивателям и усреднение по их местоположениям может быть заменено на интегрирование по объёму со средней плотностью,

$$\sum_a \overline{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_a}} \Rightarrow \int d^3 r \rho e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} = \rho (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (9.79)$$

Таким образом, для хаотически расположенных центров, влияние среды сводится к сокращению в среднем всех волн за исключением той, которая рассеивается вперёд, на нулевой угол. Тогда остаётся только амплитуда

$f(0) = f(\mathbf{k}, \mathbf{k})$, мы возвращаемся опять на энергетическую поверхность и находим

$$(\nabla^2 + k^2)\overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})} = -4\pi\rho f(0)\overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}. \quad (9.80)$$

Видно, что усреднённое действие неупорядоченной среды сводится к эффективному изменению волнового вектора волны,

$$k^2 \Rightarrow K^2 = k^2 + 4\pi\rho f(0). \quad (9.81)$$

Эффективный показатель преломления среды,

$$n = \frac{K}{k} = \sqrt{1 + \frac{4\pi\rho f(0)}{k^2}}, \quad (9.82)$$

определяется в этом приближении только плотностью среды и амплитудой рассеяния вперёд на одном центре. Детали структуры вещества несущественны. В присутствии нескольких сортов, s , рассеивателей, усреднённая амплитуда в (9.82) будет равна $\sum_s \rho_s f_s(0)$. Во многих практических случаях отличие показателя преломления (9.82) от вакуумного значения $n = 1$ мало, и можно пользоваться приближённым выражением

$$n \approx 1 + \frac{2\pi\rho f(0)}{k^2}. \quad (9.83)$$

Согласно (9.81), среда эквивалентна потенциальному барьеру высотой

$$U = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - K^2) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho f(0). \quad (9.84)$$

Этот потенциал комплексный и содержит часть отвечающую поглощению

$$U_2 \equiv \text{Im } U = -\frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho \text{Im } f(0), \quad (9.85)$$

которая, в силу оптической теоремы (7.58), может быть выражена через полное сечение,

$$U_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\rho k\sigma = -\frac{\hbar}{2}\rho v\sigma. \quad (9.86)$$

Этот результат согласуется с использованными выше элементарными оценками, основанными на длине свободного пробега Λ частицы в среде. Действительно, волновая функция в статистически однородной среде экспоненциально затухает,

$$\Psi \propto e^{-(i/\hbar)U_2 t} = e^{-\rho v\sigma t/2}, \quad (9.87)$$

и мы получаем для интенсивности пучка

$$|\Psi|^2 \propto e^{-\rho v \sigma \tau} = e^{-t/\tau}, \quad (9.88)$$

где время свободного пробега равно

$$\tau = \frac{1}{\rho v \sigma} = \frac{\Lambda}{v}, \quad \Lambda = \frac{1}{\rho \sigma}. \quad (9.89)$$

Если применимо борновское приближение (7.79), реальная часть оптического потенциала (9.84) даёт

$$U_1 \equiv \text{Re } U = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \rho \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \int d^3r U(\mathbf{r}) = \rho \int d^3r U(\mathbf{r}). \quad (9.90)$$

Это просто результат суммарного действия всех рассеивающих центров, $\overline{\sum_a U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)}$, усреднённый, как и в (9.79), по их пространственному распределению с данной плотностью $\rho = N/V$.

Задача 9.7

Найти критический угол полного отражения медленных нейтронов от поверхности ферромагнетика с внутренним полем \mathcal{B} . Пренебречь поглощением и считать, что взаимодействие нейтронов с ядрами вещества слабое и может характеризоваться положительной длиной рассеяния a , из (8.64). (Более простая версия задачи была в задаче I.2.3)

Решение Амплитуда рассеяния вперёд $f(0) = -a < 0$, так что среда менее плотная для нейтронов, чем вакуум и показатель преломления меньше единицы,

$$n \approx 1 - \frac{2\pi\rho a}{k^2}. \quad (9.91)$$

Даже для медленных нейтронов с $\lambda \sim 1$ нм и $a \sim 10^{-13}$ с $\sim 10^{-6}$ нм, отрицательный член в (9.91) мал, так что использование приближения (9.91) оправдано. Ещё нужно добавить эффект магнитного взаимодействия спина $\pm\mu\mathcal{B}$ для двух спиновых состояний, μ — магнитный момент нейтрона. Как результат, появляется двойное лучепреломление нейтронного пучка

$$n(\mathcal{B}) \approx 1 - \frac{1}{k^2} \left(2\pi\rho a \pm \frac{m}{\hbar^2} \mu\mathcal{B} \right). \quad (9.92)$$

Критический угол полного отражения ϑ_c определяется из

$$n = \cos \vartheta_c \approx 1 - \frac{\vartheta_c^2}{2}. \quad (9.93)$$

Из (9.92) мы получаем

$$\vartheta_c = \sqrt{2[1 - n(\mathcal{B})]} = \frac{1}{k} \sqrt{4\pi\rho a \pm \frac{2m}{\hbar^2} \mu\mathcal{B}}. \quad (9.94)$$

Этот угол меньше 1° для тепловых нейтронов с $E_n = 0.25$ эВ. Если магнитный член в (9.94) превышает ядерный, нейтроны с одной проекцией спина не будут отражаться и все отражённые нейтроны будут поляризованы; сравните с задачей I.2.3

9.9 Когерентное рассеяние на кристаллах

Как следует из уравнений (9.76) и (9.77), амплитуда рассеяния в среде существенно отличается от амплитуды рассеяния на одном центре *структурным фактором*,

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \Rightarrow f(\mathbf{k}', \mathbf{k})F(\mathbf{q}), \quad F(\mathbf{q}) = \sum_a e^{-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a)}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}. \quad (9.95)$$

После пространственного усреднения (9.79) в *неупорядоченной* среде остаётся только рассеяние вперёд, $\mathbf{q} = 0$, когда все центры рассеивают в фазе. Конечная амплитуда пропорциональна числу N центров; сечение в этом случае пропорционально N^2 . В *кристаллах*, суммирование по всем регулярно расположенным узлам отбирает определённые ненулевые векторы \mathbf{q} , которые отвечают *когерентному* рассеянию на многих атомах. Это происходит когда $\mathbf{q} = \mathbf{K}_j$ – одному из векторов обратной решётки, см. раздел I.8.52. Для любого из них все вклады в сумму $F(\mathbf{q})$ равны 1. При упругом рассеянии $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$, когда

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_j, \quad (9.96)$$

то это называется *условием Брэгга*. Этот результат согласуется с фактом установленным в главе I.8: регулярная решётка создаёт потенциал имеющий ненулевые фурье-компоненты только при импульсах совпадающих с векторами обратной решётки. По этой причине плоская волна не является стационарным состоянием внутри кристалла. Рассеяние на периодическом потенциале добавляет компоненты с импульсами отличающимися от начального на один из векторов \mathbf{K}_j .

Смысл условий Брэгга ясен из геометрических соображений; это очень похоже на рассеяние рентгеновских лучей обсуждавшееся в разделе 6.12. Эти условия определяют

$$k'^2 = k^2, \quad \mathbf{K}^2 = -2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{K}). \quad (9.97)$$

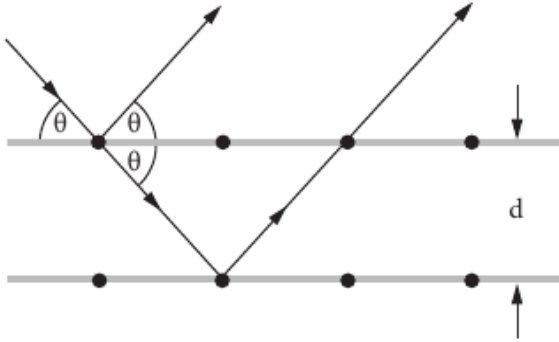


Рис. 9.5. Геометрия брэгговского рассеяния.

Эти уравнения определяют (для различных \mathbf{K}) плоскости в \mathbf{k} -пространстве. В терминах угла рассеяния ϑ ,

$$K^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}. \quad (9.98)$$

Если $\{\mathbf{r}_i\}$ – множество пространственных точек удовлетворяющих условию

$$(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i) = 2\pi n, \quad n = \text{integer}, \quad (9.99)$$

то эти точки определяют для различных n семейство параллельных плоскостей. Согласно определению обратной решётки (I.8.52), эти плоскости проходят через узлы этой решётки. Пусть расстояние между соседними плоскостями (9.99) равно d . Тогда длина вектора \mathbf{K} , который определяет это семейство может быть записана как $K = 2\pi n/d$, и из (9.98) мы находим

$$n\lambda = \frac{2\pi}{k} n = 2d \sin \frac{\vartheta}{2}, \quad (9.100)$$

где λ – длина волны частицы. Это обычная форма записи условия Брэгга, которое определяет направления интерференционных максимумов в когерентном отражении волны от системы кристаллических плоскостей. Только векторы обратной решётки удовлетворяющие условию $K < k/\pi$, или длины волн $\lambda \leq 2d$, могут давать вклад в брэгговское рассеяние. Нейтроны с $\lambda > 2d$ проходят кристалл без заметного рассеяния.

Задача 9.8

Рассмотрим молекулу состоящую из N регулярно расположенных одинаковых тяжёлых атомов. Предполагая применимость борновского приближения найти сечение упругого рассеяния частицы массы m на молекуле,

если известна амплитуда рассеяния $f(\mathbf{q})$ на одном атоме. Укажите условие когерентного рассеяния, когда сечение усиливается на фактор N^2 По отношению к рассеянию на одном атоме. Рассмотрите

- a.* два атома на расстоянии d ;
- b.* четыре атома по углам квадрата;
- c.* линейная цепочка N атомов расположенных вдоль оси x в точках $a, 2a, \dots, Na$. Здесь полезна формула суммирования геометрической прогрессии

$$\sum_{n=0}^N z^n = \frac{1 - z^{N+1}}{1 - z}. \quad (9.101)$$

... летящая стрела находится в покое, что следует из предположения, что время состоит из мгновений. (третий парадокс Зенона Элейского)

Аристотель, *Физика*

Глава 10

Реакции, распады и резонансы

10.1 Каналы реакции

Бинарная реакция

$$a + A \rightarrow b + B \quad (10.1)$$

есть обобщение процесса рассеяния на случай, когда конечные частицы могут отличаться от начальных. В ядерных реакциях используется также обозначение $A(a, b)B$, где A и B есть ядро мишени и ядро продукта реакции, а a и b — налетающая и вылетающая частицы. Обычно это значит, что ядро мишени покоится, а частицы a формируют падающий пучок. Частицы в середине обозначения, (a, b) , это те, которые регистрируются детекторами. В современных экспериментах с короткоживущими ядрами A может использоваться *обратная кинематика*, когда эти ядра образуют начальный падающий пучок.

Мы характеризуем реакцию указывая какие частицы находятся в *свободном движении* до и после взаимодействия (в *асимптотических* квантовых состояниях) и могут быть зарегистрированы детекторами. Каждый возможный набор частиц вместе со всеми их квантовыми числами, описывающими их внутренние состояния, (например, спин) образуют *канал* реакции. В вышеприведённых обозначениях канал $a \equiv (A + a)$ есть *входной* канал, а канал $b \equiv (B + b)$ есть *выходной* канал. Для каждого *открытого* (разрешённого по имеющейся энергии, см. ниже) канала в принципе возможна постановка экспериментов, в которых этот канал может быть как входным, так и выходным каналом.

Если входной канал и выходной канал совпадают, то мы говорим об *упругом* процессе, в противном случае реакция *неупругая*. Ранее мы учитывали наличие различных неупругих каналов как *поглощение*, приводящее к

уходу частиц из упругого канала. Конкретные неупругие каналы рассматривались только в рамках борновского приближения (теории возмущений). Здесь мы познакомимся несколько ближе с физикой реакций. Конечно, реакции более сложные, чем бинарные, также возможны.

Рассматривая все реакции в системе центра масс, мы можем записать полную энергию в канале a , как сумму

$$E_a = \varepsilon_a + E_a^{\text{intr}} \quad (10.2)$$

кинетической энергии относительного движения $\varepsilon_a = \mathbf{p}^2/2\mu_a$, где \mathbf{p}_a есть относительный импульс, $\mu_a = m_a m_A / (m_a + m_A)$ приведённая масса в этом канале и E_a^{intr} внутренней энергии частиц a и A . Мы не рассматриваем здесь обобщение на релятивистскую кинематику [24]. В реакции $a \rightarrow b$ сохраняется полная энергия E ,

$$E_a = \varepsilon_a + E_a^{\text{intr}} = \varepsilon_b + E_b^{\text{intr}} = E_b \equiv E. \quad (10.3)$$

Изменение кинетической энергии в процессе носит название *тепловой эффект* реакции или её Q ,

$$Q_{ba} = \varepsilon_b - \varepsilon_a = E_a^{\text{intr}} - E_b^{\text{intr}}. \quad (10.4)$$

Он полностью определяется внутренней структурой реагентов.

Реакции $a \rightarrow b$ с $Q_{ba} > 0$ называются *экзотермическими*. Они энергетически возможны при любой начальной кинетической энергии ε_a (выигрыш в кинетической энергии за счёт внутренней энергии). *Эндотермические* реакции, $Q_{ba} < 0$, сопровождаются потерей кинетической энергии. Они возможны только если $\varepsilon_a + Q_{ba} > 0$, поскольку всегда должно быть $\varepsilon_b \geq 0$. Тогда необходимо, чтобы $\varepsilon_a \geq -Q_{ba} > 0$. Это значит, что существует положительная *пороговая* энергия,

$$\varepsilon_{a \rightarrow b}^{\text{th}} = -Q_{ba} = E_b^{\text{intr}} - E_a^{\text{intr}} > 0, \quad (10.5)$$

и реакция $a \rightarrow b$ возможна только выше этого порога, когда $\varepsilon_a > \varepsilon_{a \rightarrow b}^{\text{th}}$. Величина полной энергии, при которой канал b становится активным,

$$E = E_b^{\text{intr}} = \varepsilon_{a \rightarrow b}^{\text{th}} + E_a^{\text{intr}} \equiv E_b^{\text{th}}, \quad (10.6)$$

не зависит от канала a и определяет абсолютный порог E_b^{th} для канала b . Ниже этого порога канал b *закрыт*.

10.2 Матрица рассеяния для многоканальных реакций

Теперь мы можем обобщить одноканальное описание на случай многих открытых каналов. Здесь мы также будем пользоваться стационарной формулировкой и работать на энергетической поверхности при фиксированной величине E .

В канале a , волновая функция системы $(a + A)$ может быть представлена как произведение функции ψ^a , описывающей относительное движение и внутренней волновой функции Φ^a частиц a и A ,

$$\Psi^a = \psi^a \Phi^a. \quad (10.7)$$

Полная волновая функция реакции содержит все возможные каналы,

$$\Psi = \sum_a \Psi^a. \quad (10.8)$$

В упругом канале, $a \rightarrow a$, волновая функция относительного движения $\psi^a(\mathbf{r})$ имеет стандартный асимптотический вид

$$\psi^a \approx e^{ik_a z} + f^{aa}(\theta) \frac{e^{ik_a r}}{r}, \quad (10.9)$$

где ось z взята в направлении падающего пучка, $f^{aa}(\theta)$ — упругая амплитуда и k_a — волновой вектор относительного движения в этом канале, $\varepsilon_a = \hbar^2 k_a^2 / 2\mu_a$. Волновые функции неупругих каналов $b \neq a$ не имеют падающей волны. В асимптотической области функция $\psi^{b \neq a}$ содержит только расходящуюся сферическую волну с неупругой амплитудой f^{ba} . Удобно нормировать неупругие амплитуды таким образом, чтобы в асимптотике

$$\psi^b \approx f^{ba}(\theta) \sqrt{\frac{\mu_b}{\mu_a}} \frac{e^{ik_b r}}{r}. \quad (10.10)$$

С определением (10.10) радиальный поток уходящий к детектору площади $d\mathcal{A} = r^2 d\Omega_b$ в канале b равен

$$j_b d\mathcal{A} = \frac{|f^{ba}|^2}{r^2} \frac{\mu_b}{\mu_a} v_b r^2 d\Omega_b. \quad (10.11)$$

Здесь $v_b = \hbar k_b / \mu_b$ — относительная скорость в канале b . Поделив на падающий поток мы найдём дифференциальное сечение реакции $a \rightarrow b$,

$$\frac{d\sigma^{ba}}{d\Omega_b} = |f^{ba}|^2 \frac{\mu_b v_b}{\mu_a v_a} = |f^{ba}|^2 \frac{k_b}{k_a}. \quad (10.12)$$

Отношение волновых векторов связано с доступной плотностью конечных состояний; оно уже появлялось и в борновском приближении.

Матрица рассеяния S теперь является оператором в пространстве каналов. Обобщая одноканальное выражение мы определим матричный элемент этого оператора для перехода $a \rightarrow b$ как

$$S^{ba} \equiv (1 - iT)^{ba} = \delta^{ba} + 2i\sqrt{k_a k_b} f^{ba}. \quad (10.13)$$

Эти определения матрицы перехода T и амплитуды f согласуются с (7.22) и (7.62). Матрицы S, T и f всё ещё операторы по дополнительным квантовым числам состояний канала. Сечение реакции (10.12) теперь может быть переписано как

$$\frac{d\sigma^{ba}}{d\Omega_b} = \frac{1}{4k_a^2} |S^{ba} - \delta^{ba}|^2 = \frac{|T^{ba}|^2}{4k_a^2}. \quad (10.14)$$

Если взаимодействие в некотором канале является центрально симметричным, то мы можем использовать для волновой функции в этом канале разложение по парциальным волнам, см. раздел 8. Тогда S^{ba}, T^{ba} и f^{ba} диагональны по орбитальному моменту ℓ , так что уравнение (10.13) может быть написано для каждой парциальной волны,

$$S_\ell^{ba} = \delta^{ba} - iT_\ell^{ba} = \delta^{ba} + 2i\sqrt{k_a k_b} f_\ell^{ba}. \quad (10.15)$$

Это очевидное обобщение выражения (8.7) полученного для упругого рассеяния.

Предполагая центральную симметрию, мы можем выразить парциальные амплитуды рассеяния через соответствующие элементы матрицы рассеяния,

$$f_\ell^{aa} = \frac{S_\ell^{aa} - 1}{2ik_a}, \quad f_\ell^{ba} = \frac{S_\ell^{ba}}{2i\sqrt{k_a k_b}}. \quad (10.16)$$

Используя в (10.12) разложения по парциальным волнам и интегрируя по углам подобно тому, как это было сделано в (32.9), мы получаем

$$\sigma_{\text{el}} \equiv \sigma^{aa} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_\ell (2\ell + 1) |S_\ell^{aa} - 1|^2, \quad (10.17)$$

$$\sigma^{b \neq a} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_\ell (2\ell + 1) |S_\ell^{ba}|^2. \quad (10.18)$$

С другой стороны, полное неупругое сечение было найдено в (8.10) как сечение поглощения. В наших теперешних обозначениях,

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)(1 - |S_{\ell}^{aa}|^2). \quad (10.19)$$

По определению поглощения,

$$\sigma_{\text{inel}} = \sum_{b \neq a} \sigma^{ba}, \quad (10.20)$$

и из сравнения (10.18) и (10.19),

$$1 - |S_{\ell}^{aa}|^2 = \sum_{b \neq a} |S_{\ell}^{ba}|^2. \quad (10.21)$$

Это есть не что иное, как особая форма условия унитарности (7.19), т.е. сохранения вероятностей теперь в пространстве каналов,

$$S^{\dagger}S = 1 \quad \rightsquigarrow \quad \sum_b S^{ba*} S^{bc} = \delta^{ac}. \quad (10.22)$$

При $c = a$, выражения (10.22) и (10.21) совпадают. В терминах матрицы перехода унитарность выражается как

$$T^{\dagger}T - i(T - T^{\dagger}) = 0. \quad (10.23)$$

10.3 Детальное равновесие

Важные свойства многоканальной матрицы рассеяния следуют из *инвариантности относительно обращения времени*. В силу этой инвариантности амплитуда f^{ba} процесса $a \rightarrow b$ должна быть равна амплитуде $f^{\tilde{a}\tilde{b}}$ \mathcal{T} -обращённого процесса $\tilde{b} \rightarrow \tilde{a}$.

Как мы знаем, обращение времени включает перестановку начального и конечного состояний и обращение (обозначаемое тильдой) всех импульсов и угловых моментов. Таким образом, инвариантность относительно обращения времени даёт связь между амплитудами прямых и обратных реакций,

$$f^{ba} = f^{\tilde{a}\tilde{b}}, \quad S^{ba} = S^{\tilde{a}\tilde{b}}, \quad (10.24)$$

для бесспиновых частиц мы бы имели соотношение взаимности, $S^{ba} = S^{ab}$ [?]. Используя уравнение (10.24), мы получаем для дифференциального сечения (10.12) обратного процесса

$$\frac{d\sigma^{\tilde{a}\tilde{b}}}{do_{\tilde{a}}} = |f^{\tilde{a}\tilde{b}}|^2 \frac{k_{\tilde{a}}}{k_{\tilde{b}}} = |f^{ba}|^2 \frac{k_a}{k_b}, \quad (10.25)$$

поскольку величина импульса не меняется при отражении времени. Уравнения (10.12) и (10.25) позволяют сформулировать принцип *детального равновесия* как соотношение между сечениями прямых и обратных процессов,

$$\frac{d\sigma^{\tilde{a}\tilde{b}}}{do_{\tilde{a}}} k_b^2 = \frac{d\sigma^{ba}}{do_b} k_a^2. \quad (10.26)$$

Естественно, поскольку сравнение идёт при той же величине энергии E в системе центра масс, кинематики для этих двух процессов просто меняются местами.

В *борновском приближении* инвариантность относительно обращения времени ведёт к дополнительным симметриям, как уже обсуждалось в разделе 8.10. В многоканальной задаче это тоже имеет место. Элементы S -матрицы в борновском приближении пропорциональны соответствующим матричным элементам гамильтониана возмущения (7.38), $S^{ba} \propto \langle b|H'|a\rangle$. Поскольку гамильтониан эрмитовский, $|S^{ba}|^2 = |S^{ab}|^2$, и мы получаем соотношение подобное (10.26), но для прямой, $a \rightarrow b$, и *обратной*, $b \rightarrow a$, реакций без обращения времени,

$$\left(\frac{d\sigma^{ab}}{do_a}\right)_B k_b^2 = \left(\frac{d\sigma^{ba}}{do_b}\right)_B k_a^2. \quad (10.27)$$

Здесь нижний индекс B обозначает борновское приближение.

Комбинируя инвариантность относительно обращения времени, $a \rightarrow \tilde{b}$, $b \rightarrow \tilde{a}$, с борновской симметрией, $a \leftrightarrow b$, мы заключаем, что имеется инвариантность по отношению к простому изменению знаков импульсов и спинов без обращения времени, $a \rightarrow \tilde{\tilde{a}}$, $b \rightarrow \tilde{\tilde{b}}$. В этом причина, по которой не появляется поляризация при рассеянии неполяризованных частиц в борновском приближении, см. раздел 8.10. Ненулевая поляризация возникает (*задача 8.7*) для *комплексного* потенциала, который имитирует существование неупругих каналов, но нарушает эрмитовость и инвариантность относительно обращения времени. Если, вместо комплексного

потенциала, мы бы описывали поглощение явно, с помощью неупругих каналов, результат для упругого рассеяния выходил бы за рамки борновского приближения.

Часто *усреднённая* форма принципа детального равновесия (10.26) бывает довольно полезной. Пусть J_a и m_a соответственно спин частицы a (полный внутренний угловой момент) и его проекция. Определим усреднённое сечение $\overline{\sigma^{ba}}$ путём интегрирования по конечным углам do_b , суммирования по проекциям спинов m_b и m_B конечных частиц, усреднения по проекциям спинов m_a и m_A начальных частиц и усреднения по направлениям \mathbf{k}_a падающей волны,

$$\overline{\sigma^{ba}} = \left(\frac{1}{2J_a + 1} \sum_{m_a} \right) \left(\frac{1}{2J_A + 1} \sum_{m_A} \right) \sum_{m_b} \sum_{m_B} \int \frac{do_a}{4\pi} \int do_b \frac{d\sigma^{ba}}{do_b}. \quad (10.28)$$

Здесь вклады $a \rightarrow b$ и $\tilde{a} \rightarrow \tilde{b}$ входят на равных основаниях. Поэтому, для усреднённых сечений имеем

$$\overline{\sigma^{ba}} = \overline{\sigma^{b\tilde{a}}}. \quad (10.29)$$

Если мы проведём ту же процедуру усреднения (10.28) для принципа детального равновесия (10.26), мы придём к его усреднённой версии,

$$(2J_a + 1)(2J_A + 1)k_a^2 \overline{\sigma^{ba}} = (2J_b + 1)(2J_B + 1)k_b^2 \overline{\sigma^{ab}}. \quad (10.30)$$

Выполнение соотношения (10.30) между сечениями прямых и обратных реакций это простейшая проверка инвариантности относительно обращения времени.

10.4 Сечения для медленных частиц

Вблизи порога для данного канала возникшие частицы движутся очень медленно. Начальные частицы также могут быть медленными. В этих случаях можно получить общие оценки по аналогии с результатами раздела 8 для низкоэнергетического потенциального рассеяния. Такие универсальные оценки можно делать только при наличии плавной зависимости от энергии, что может иметь место для фона под возможными резонансами, которые отвечают относительно долгоживущим квазистационарным состояниям.

Мы начнём с *экзотермической реакции* где начальная кинетическая энергия мала. Пусть R_a — радиус сил между частицами во входном канале a . Волновой вектор k_a и кинетическую энергию $\varepsilon_a = \hbar^2 k_a^2 / 2\mu_a$ можно считать

малыми, когда, в согласии с критерием (8.58), длина волны относительного движения велика по сравнению с радиусом взаимодействия, $k_a R_a \ll 1$. В области взаимодействия $r < R_a$, парциальные волны с орбитальным моментом $\ell \neq 0$ подавлены $\propto (k_a r)^\ell \ll 1$, см. (П.2.80). Соответствующие амплитуды реакции малы и мы можем использовать оценку по теории возмущений предполагая, амплитуды перехода пропорциональны матричному элементу гамильтониана взаимодействия H'_{ba} . В пределе малых k_a оператор \hat{H}' не зависит от малой входной энергии.

Для *упругого* рассеяния, $a \rightarrow a$, обе, начальная и конечная, волновые функции в этом матричном элементе пропорциональны k_a^ℓ . Поэтому, амплитуда перехода $f_\ell^{aa} \propto k_a^{2\ell}$, и для упругого сечения (10.12) с $b = a$, мы получаем

$$\sigma_\ell^{aa} \propto k_a^{4\ell} \propto \varepsilon_a^{2\ell}. \quad (10.31)$$

Это та же оценка, которая была выведена для потенциального рассеяния через фазы рассеяния, см. (8.14) и (8.57).

Для *неупругого экзотермического* процесса $a \rightarrow b$, волновой вектор конечной частицы k_b имеет ненулевую величину $(2m_b Q_{ba})^{1/2}/\hbar$, которая не зависит от начального волнового вектора k_a , когда $k_a \rightarrow 0$. Потому в матричном элементе H'_{ba} только начальная функция чувствительна к k_a , так что $f_\ell^{ba} \propto k_a^\ell$, и согласно (10.12),

$$\sigma_\ell^{ba} \propto \frac{k_a^{2\ell}}{k_a} \propto k_a^{2\ell-1} \propto \varepsilon_a^{\ell-1/2}. \quad (10.32)$$

При низких энергиях только s -волна взаимодействует эффективно. Для s -волнового поглощения мы получаем возрастание сечения в согласии с законом $1/v$,

$$\sigma_0^{ba} \propto \varepsilon_a^{-1/2} \propto \frac{1}{v_a}. \quad (10.33)$$

Закон $1/v$ справедлив для нейтральной частицы a , например для захвата медленного нейтрона ядром, который сопровождается излучением другой частицы (протона или альфа) или гамма кванта. Если начальная частица a имеет положительный заряд, то центробежный барьер, порождающий ℓ -зависимость в выражениях (10.31) и (10.32) дополняется кулоновским барьером. Вероятность поглощения тогда включает дополнительно пропускание кулоновского барьера (*фактор Гамова*), см. (I.2.66), который зависит от произведения $Z_a Z_A$ зарядов частиц a и A ,

$$P_a = e^{-2\pi Z_a Z_A e^2 / \hbar v_a}. \quad (10.34)$$

В результате, сечение поглощения для медленных частиц становится очень малым.

Для *эндотермической* реакции $a \rightarrow b$, например, рассеяние нейтрона с возбуждением ядра мишени, мы сможем сделать общее заключение о сечениях вблизи порога, когда рассеянный нейтрон (частица b) имеет очень малую энергию $\varepsilon_b = \varepsilon_a + Q_{ba} = \varepsilon_a - \varepsilon_a^{th}$, и конечный волновой вектор равен

$$k_b = \sqrt{\frac{2m_b}{\hbar^2}(\varepsilon_a - \varepsilon_a^{th})}. \quad (10.35)$$

в этом случае *конечное* относительное движение медленно и его волновая функция чувствительна к малому избытку энергии выше порога, будучи пропорциональной k_b^ℓ , если конечное состояние имеет относительный орбитальный момент ℓ . Такое же выражение (10.12) определяет сечение вблизи порога для испускания частицы ℓ -той парциальной волне,

$$\sigma_\ell^{ba} \propto k_b^{2\ell} k_b \propto k_b^{2\ell+1} \propto (\varepsilon_a - \varepsilon_a^{th})^{\ell+1/2}. \quad (10.36)$$

Опять, сечение заметно только в s -волне где сечение растёт как корень квадратный из избытка энергии выше порога. Для вылета положительно заряженной частицы сечение, как и раньше, подавлено проникаемостью P_b , (10.34).

10.5 Пороги и унитарность

Требование унитарности является мощным инструментом, который диктует многие черты сечения. С увеличением энергии открываются новые каналы реакции. Каждый новый порог есть особая точка в матрице рассеяния как функции энергии: в связи с появлением нового канала, который имеет очень малое сечение около порога, сечения в ранее открытых каналах, следует изменить для выполнения условия унитарности (10.22), которое накладывает ограничение на все открытые каналы через сохранение вероятности. Не входя в детали аналитических свойств S -матрицы мы проиллюстрируем возможное поведение на простом примере [25].

Упругий канал a открыт при любой положительной кинетической энергии ε_a . Мы рассмотрим упругое сечение вблизи пороговой точки для неупругой реакции $a \rightarrow b$. Общий асимптотический вид многоканальной волновой функции (10.8) реакции инициируемой во входном канале a есть, согласно (10.10) и (10.16),

$$\Psi \approx e^{i(\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a)} \Phi^a + \sum_b \frac{e^{ik_b r_b}}{r_b} \sqrt{\frac{\mu_a}{\mu_b}} \frac{1}{2i\sqrt{k_a k_b}} \sum_\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta_b) (S_\ell^{ba} - \delta^{ba}) \Phi^b.$$

$$(10.37)$$

Ниже порога реакции $a \rightarrow b$, волновой вектор k_b в закрытом канале b чисто мнимый, см. (10.35), $k_b = i\kappa_b$ с реальным $\kappa_b > 0$, где знак определяется правильным поведением волновой функции на больших расстояния r_b в канале b : соответствующая часть волновой функции (10.37) падает экспоненциально, $\propto \exp(-\kappa_b r_b)$. Это значит, что вероятность найти частицы b и B в асимптотике $r_b \rightarrow \infty$ равна нулю ниже порога, хотя эти частицы виртуально появляются на малых расстояниях $r_b < \kappa_b^{-1}$. Размер локализации возрастает с уменьшением энергии связи $\hbar^2 \kappa^2 / 2\mu_b$. Канал b открывается (частицы b и B не связаны) при $k_b = \kappa_b = 0$, или $\kappa_b^{-1} \rightarrow \infty$, когда асимптотическая форма (10.37) превращается в реальную уходящую волну соответствующую этому каналу и частица b может достичь удалённого детектора.

Рассмотрим s -волну, когда условие унитарности (10.21) для двух открытых каналов a и b даёт

$$|S_0^{aa}|^2 = 1 - |S_0^{ba}|^2. \quad (10.38)$$

Сразу выше порога реакции $a \rightarrow b$, правая часть уравнения (10.38) линейна по k_b , как мы видели в (10.36),

$$|S_0^{ba}|^2 = \rho k_b, \quad (10.39)$$

где ρ — действительная положительная константа. Тогда

$$|S_0^{aa}|^2 = 1 - \rho k_b. \quad (10.40)$$

Откуда упругий элемент S -матрицы имеет с точностью до членов квадратичных по k_b , вид справедливый выше порога,

$$S_0^{aa} = M(k_b) \left(1 - \frac{\rho}{2} k_b\right), \quad (10.41)$$

где $M(k_b)$ — неизвестная фаза,

$$|M(k_b^2)|^2 = 1 \quad \rightsquigarrow \quad M(k_b) = e^{i\varphi(k_b)} \quad (10.42)$$

с действительной функцией $\varphi(k_b)$. В пороговой области (малые $k_b > 0$) мы можем разложить эту функцию в ряд Тэйлора с действительными коэффициентами φ_n ,

$$\varphi(k_b) \approx \varphi_0 + \varphi_1 k_b + \frac{1}{2} \varphi_2 k_b^2 + \dots \quad (10.43)$$

Ниже порога канал $a \rightarrow b$ закрыт и

$$|S_0^{aa}|^2 = 1. \quad (10.44)$$

Здесь S -матрица полностью определена фазами рассеяния. Точно на пороге

$$S_0^{aa}(k_b = 0) = e^{2i\delta_0}, \quad (10.45)$$

где фаза рассеяния δ_0 взята при пороговой энергии. Из (10.41-10.45) мы видим, что

$$\varphi_0 = 2\delta_0. \quad (10.46)$$

Теперь мы предположим, что возможно аналитически продолжить упругую часть S -матрицы (10.41) в подпороговую область, где это выражение приобретает вид

$$S_0^{aa} = M(i\kappa_b) \left(1 - i\frac{\rho}{2}\kappa_b\right). \quad (10.47)$$

Это выражение должно быть совместимо с условием унитарности (10.44) ниже порога, которое даёт

$$1 = |S_0^{aa}|^2 = |M(i\kappa_b)|^2 \left(1 - i\frac{\rho}{2}\kappa_b\right) \left(1 + i\frac{\rho}{2}\kappa_b\right) \approx |M(i\kappa_b)|^2 \quad (10.48)$$

если мы пренебрежём членами выше, чем первая степень k_b . Таким образом, уравнение (10.42) удовлетворено по обе стороны порога и в обеих областях фаза $\varphi(k_b)$ должна быть действительной. С другой стороны, ниже порога мы имеем вместо (10.43),

$$\varphi \approx 2\delta_0 + i\varphi_1\kappa_b - \frac{1}{2}\varphi_2\kappa_b^2 + \dots, \quad (10.49)$$

и функция только если она есть чётная функция волнового вектора и все нечётные коэффициенты ряда Тэйлора исчезают. Поэтому, $\varphi_1 = 0$. Окончательно, с точностью до членов порядка k_b^2 , упругая часть S -матрицы может быть записана выше и ниже порога как

$$S_0^{aa} = e^{2i\delta_0} \left(1 - \frac{\rho}{2}k_b\right) + O(k_b^2); \quad (10.50)$$

ниже порога нужно просто заменить k_b на $i\kappa_b$.

Упругое сечение (10.17) вблизи порога (на обеих сторонах!) может быть записано теперь с помощью (10.50) как

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k_a^2} |1 - S_0^{aa}|^2 = \frac{\pi}{k_a^2} \left\{ 4 \sin^2 \delta_0 - \rho \operatorname{Re} \left[k_b \left(1 - e^{2i\delta_0} \right) \right] \right\} + O(k_b^2). \quad (10.51)$$

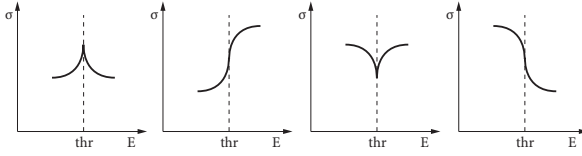


Рис. 10.1. Пороговые аномалии.

Выше порога для реакции $a \rightarrow b$,

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k_a^2} [4 \sin^2 \delta_0 - \rho k_b (1 - \cos 2\delta_0)], \quad (10.52)$$

или введя упругое сечение точно на пороге,

$$\sigma_{\text{el}}^{\text{th}} = \frac{4\pi}{k_a^2} \sin^2 \delta_0, \quad (10.53)$$

и выражение (10.35) для волнового вектора k_b выше порога, мы получаем

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{el}}^{\text{th}} \left[1 - \frac{\rho}{2} \sqrt{\frac{2\mu_b}{\hbar^2} (\varepsilon_a - \varepsilon_a^{\text{th}})} \right]. \quad (10.54)$$

Между тем, ниже порога, с мнимым $k_b = i\kappa_b$, мы имеем из (10.51)

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k_a^2} (4 \sin^2 \delta_0 - \rho \kappa_b \sin 2\delta_0) = \sigma_{\text{el}}^{\text{th}} \left[1 - \frac{\rho}{2} \cot \delta_0 \sqrt{\frac{2\mu_b}{\hbar^2} (\varepsilon_a^{\text{th}} - \varepsilon_a)} \right]. \quad (10.55)$$

Сравнивая выражения (10.54) и (10.55), мы видим разрыв производной упругого сечения, как функции энергии в упругом канале a на пороге неупругой реакции $a \rightarrow b$. Этот "*острый выступ*" определяется величиной и знаком $\cot \delta_0$ на пороге. Рис. 10.1 [25] демонстрирует возможные типы порогового поведения упругого сечения.

Аномалия не появляется, если частицы b и B испытывают взаимное кулоновское *отталкивание*. В этом случае, проникаемость кулоновского барьера (фактор Гамова (10.34)) в канале b стремится к нулю на пороге, когда $v_b \rightarrow 0$. Для кулоновского *притяжения* в канале b ситуация более сложная из-за резонансов связанных с дискретными кулоновскими состояниями.

10.6 Изолированные резонансы; экспоненциальный и не экспоненциальный распады

Типичную резонансную реакцию можно представлять как процесс идущий через захват частицы a мишенью A с образованием промежуточного состояния r . Через некоторое время, нестабильное состояние r распадается на конечные продукты b и B , которые могут быть, в частности, теми же, что и во входном канале a . Чтобы избежать более сложных вопросов интерференции между различными резонансами, мы будем сначала предполагать, что ширина Γ резонанса r мала по сравнению с расстоянием до других резонансов — резонансы *не перекрываются*.

Напомним наше первоначальное обсуждение нестабильных состояний, раздел I.5.8. Перекрытие вектора состояния $|\Psi(t)\rangle$ с начальным состоянием $|\Psi_0\rangle$ убывает со временем предположительно экспоненциально,

$$P(t) = |\langle\Psi_0|\Psi(t)\rangle|^2 \approx e^{-\Gamma t/\hbar}. \quad (10.56)$$

Перекрытие (10.56) есть *вероятность выживания*, см. раздел I.7.8. Ширина Γ определяет среднее время жизни состояния $|\Psi_0\rangle$, $\tau = \hbar/\Gamma$, и неопределённость его энергии, $\Delta E \sim \hbar/\tau \sim \Gamma$. Временная зависимость (10.56) имеет место, если эволюция во времени волновой функции даётся

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-(i/\hbar)\mathcal{E}t}|\Psi_0\rangle, \quad (10.57)$$

где мы ввели *комплексную энергию* $\mathcal{E} = E_0 - \frac{i}{2}\Gamma$; её реальная часть E_0 характеризует собственно энергию, а мнимая часть даёт ширину, обратное время жизни. Все резонансные точки \mathcal{E} расположены в нижней части комплексной плоскости энергии, $\Gamma > 0$. Нормированное распределение вероятности реальной части энергии даётся распределением Лоренца (I.5.79), которое в теории реакций носит название формулы *Брейта-Вигнера* (БВ, 1936), см. рис. I.5.10,

$$w(E) = \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dE w(E) = 1. \quad (10.58)$$

Важной особенностью БВ-распределения является *бесконечность её второго момента*: интеграл $\int dE (E - E_0)^2 f(E)$ расходится из-за очень слабого убывания далёких крыльев БВ-распределения. Но мы знаем (см. раздел I.5.8), что БВ-распределение не является полностью реалистичным для всех энергий. Присутствие бесконечно малых энергий в (10.58) нефизично, потому что нет состояний в гильбертовом пространстве системы с энергиями ниже, чем энергия основного состояния. Нельзя утверждать, что

экспоненциальное убывание (10.56) справедливо в течение всего процесса распада.

Реальное временное поведение распадающегося состояния определённо должно отличаться от (10.56), по крайней мере на начальной стадии, как мы видели в разделе I.7.8. На ранней стадии эволюции скорость распада определяется неопределённостью (флуктуацией) энергии $\langle(\Delta E)^2\rangle$ в начальном нестационарном волновом пакете. Согласно уравнению (I.7.119), *вероятность* распада, $1 - P(t)$, растёт *квадратично* со временем (*скорость* распада, $-\dot{P}$, возрастает линейно), в то время как для экспоненциального распада вероятность распада линейна, а скорость распада постоянна. Здесь уместно вспомнить вывод в разделе 2.1 золотого правила, которое предсказывает постоянную скорость перехода (2.6). Это имеет место только при достаточно большой длительности процесса, больше, чем время действия возмущения. На очень коротких временах, при замене синуса на его аргумент в уравнении (2.8), мы получаем результат аналогичный (I.7.119),

$$|a_f(t)|^2 = |H'_{fi}|^2 \frac{t^2}{\hbar^2}. \quad (10.59)$$

Такое же поведение, типичное для малого времени действия возмущения, $\Omega t \ll 1$, можно увидеть в двухуровневой задаче, см. (II.5.56). В идеализированном БВ-случае неопределённость энергии $\langle(\Delta E)^2\rangle$ бесконечна и разложения используемые в (I.7.117) и (I.7.118) неверны.

Задача 10.1

Доказать неравенство (I.7.127) для вероятности выживания при $t < \pi\hbar/2(\Delta E)$, где ΔE — неопределённость энергии начального состояния,

$$P(t) \geq \cos^2 \left((\Delta E) \frac{t}{\hbar} \right), \quad (10.60)$$

используя альтернативное представление вероятности выживания в терминах спектра E_n стационарных состояний $|n\rangle$,

$$P(t) = \sum_{nm} |c_n|^2 |c_m|^2 \cos \left(\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar} \right), \quad (10.61)$$

где $|\Psi_0\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$.

10.7 Квантовый эффект Зенона

Проблема экспоненциального или не экспоненциального распада близко связана с возобновлением дискуссии по так называемым *парадоксам Зенона*.

Оригиналы парадоксов, приписываемых древнему философу Зенону из Илеи (*Зенон Илейский*), обсуждались в "*Физике*" *Аристотеля*.

Древние парадоксы имеют отношение к природе пространства и времени. Ахиллес никогда не догонит черепаху, потому что за любое конечное время его движения черепаха продвинется чуть дальше; нельзя начать движение, потому что прежде чем пройти всю дистанцию, нужно пройти половину её и т. д.; движение невозможно вообще, потому что в любой момент времени летящая стрела занимает определённое положение в пространстве и кажется неподвижной — ваше наблюдение "замораживает" движение. Аналогию с парадоксом стрелы можно найти [26] в мысленном эксперименте с распадающейся квантовой системой.

Грубо, парадокс можно описать следующим образом. Если начальное состояние $|\Psi_0\rangle$ системы приготовленное при $t = 0$ нестационарно, то при $t > 0$ оно эволюционирует в суперпозицию $|\Psi_0\rangle$ стационарных и ортогональных состояний (продуктов распада). Однако, если измерение обнаружит систему всё ещё в первоначальном состоянии, то это можно рассматривать как новое приготовление системы и начать отсчёт времени сначала. Производя измерения через очень короткие промежутки времени, представляется возможным полностью затормозить распад. Можно даже думать, что *отрицательный результат*, ненаблюдение распада, должен уже сделать распад невозможным. Действительно, если наш детектор не регистрирует никаких продуктов распада, то это эквивалентно измерению отсутствия распада и следовательно утверждению, что система находится в начальном состоянии $|\Psi_0\rangle$; тогда можно снова начать отсчёт времени с нуля.

Вернёмся теперь к вероятности выживания (10.56) и предположим, что за короткий интервал времени δt эта вероятность убывает на

$$P(\delta t) = 1 - x(\delta t)^\alpha, \quad (10.62)$$

где $x > 0$ зависит от свойств начального состояния, а $\alpha > 0$ — некоторая степень, равная 1 для чисто экспоненциального распада. Повторим измерения начального состояния N раз за конечный интервал времени $t = N \cdot \delta t$. Тогда, полная вероятность выживания даётся

$$P_N(t) = \left[1 - x \left(\frac{t}{N} \right)^\alpha \right]^N. \quad (10.63)$$

В пределе непрерывных измерений, $\delta t \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$, при фиксированной конечной величине t ,

$$P(t) \rightarrow \exp \left[-xt(\delta t)^{\alpha-1} \right]. \quad (10.64)$$

Здесь видно различие между экспоненциальным, $\alpha = 1$, и не экспоненциальным распадами. При $\alpha = 1$, распад продолжается экспоненциально независимо от стратегии измерений. В противоположность этому, при $\alpha > 1$, как это имеет место в стандартной ситуации с $\alpha = 2$, вероятность распада подавлена. При $\delta t \rightarrow 0$, вероятность выживания стремится к 1.

На самом деле нельзя иметь непрерывные измерения. Любые такие попытки в соответствии с соотношением неопределенности энергия-время, будут сильно искажать исследуемую систему. Тем не менее, наличие эффекта Зенона за конечные но короткие интервалы между измерениями было подтверждено экспериментами с атомами в ловушке под влиянием периодических лазерных импульсов [27]. Поскольку не экспоненциальный этап охватывает лишь небольшую часть начальной истории распада, существует характерное время (иногда называется *время Зенона* t_Z , оно обычно того же порядка, что и типичные периоды невозмущенного движения в квазистационарной системе), когда имеет место переход к нормальному экспоненциальному поведению. Здесь измерения могут действовать в противоположном направлении *ускоряя* процессы распада. Этот *анти-эффект Зенона* также был найден экспериментально [28]. Ситуацию может также осложнить вмешательство *волны отдачи* идущей назад от измерительной аппаратуры с примесями невозмущенных состояний отличных от имеющихся в начальном состоянии. Эти помехи могут вносить колебания во временном развитии вероятности выживания.

Все эти нетривиальные эффекты появляются только вследствие физического взаимодействия устройства детектирования и распадающейся или колеблющейся системы. Для того, чтобы разрушить суперпозицию состояний, соответствующих начавшемуся распаду и вернуть систему в исходное состояние, гамильтониан \hat{H}_d взаимодействия с детектором *не должен коммутировать* с внутренним гамильтонианом \hat{H}' ответственным за распад. (Мы еще вернемся к проблеме измерений в конце курса). Если пассивный детектор просто ждёт прихода продуктов распада, но не взаимодействует непосредственно с системой, то он не может влиять на скорость распада — его Гамильтониан коммутирует с \hat{H}' . Поэтому, "*отрицательный результат*" эксперимента не производит никакого действия на систему и такой *парадокс Зенона* исключён [29].

Нужно отметить, что не экспоненциальный ход процесса распада имеет место и в самой поздней стадии, которая трудна для измерения из-за очень небольшого количества оставшегося материала. В некоторых ядерных процессах экспоненциальное развитие прослеживалось в течение 40-50

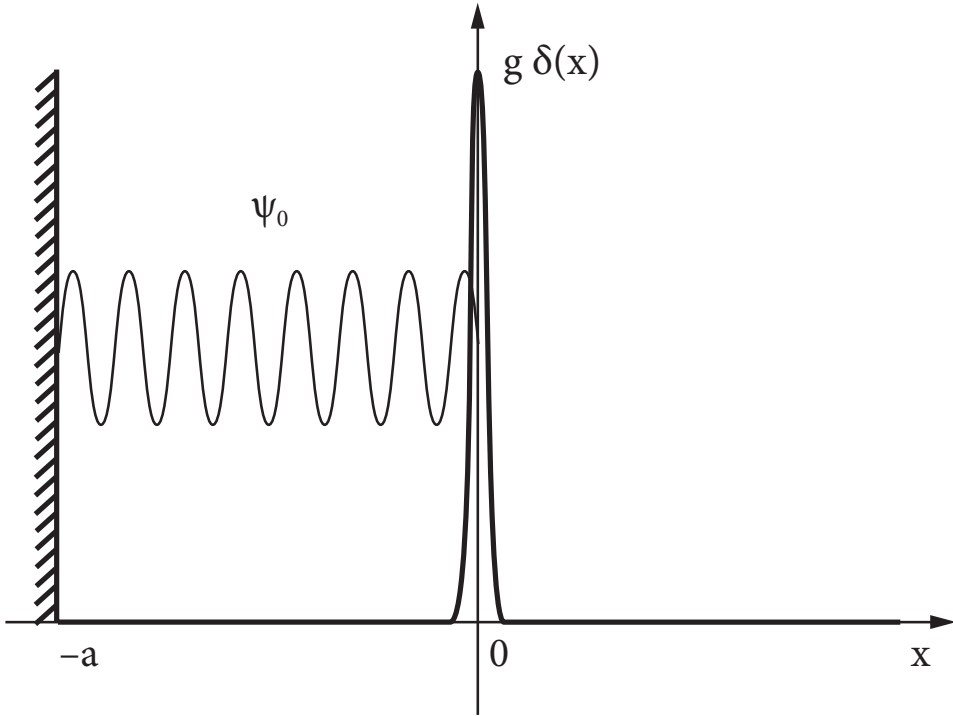


Рис. 10.2. Потенциал и начальная волновая функция для задачи 10.2.

времен жизни. Механизм отклонения от экспоненциального распада при $t \gg \tau$ можно понять, на простой модели [30].

Задача 10.2

Найти поведение в пределе больших времен вероятности выживания в потенциале Рис. 10.2 с непроницаемой стенкой при $x = -a$ и отталкивающим барьером $g\delta(x)$ при $x = 0$, если вначале частица была приготовлена в стационарном состоянии ящика $-a \leq x \leq 0$.

Решение Начальная волновая функция даётся

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad -a \leq x \leq 0, \quad (10.65)$$

и $\Psi_0 = 0$ вне ящика. Развитие во времени определяется стационарными состояниями $\psi_k(x)$ имеющегося потенциала. Они нумеруются волновым вектором k задачи рассеяния с энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Условие регулярности

при $x = -a$ даёт

$$\psi_k(x) = \begin{cases} A(k) \sin[k(x+a)], & -a \leq x \leq 0, \\ B(k)e^{ikx} + B'(k)e^{-ikx}, & x > 0 \end{cases} \quad (10.66)$$

Стандартные условия сшивки для дельта-функционального потенциала (*задача I.9.11*) определяют

$$\frac{B}{A} = F(k), \quad \frac{B'}{A} = F^*(k), \quad (10.67)$$

где

$$F(k) = \frac{1}{2} \left[\left(1 - i \frac{V}{ka} \right) \sin(ka) - i \cos(ka) \right], \quad V = \frac{2mag}{\hbar^2}. \quad (10.68)$$

Поэтому внешняя часть волновой функции (10.66) может быть записана как

$$\psi_k(x \geq 0) = A(k) \left\{ \sin[k(x+a)] + \frac{V}{ka} \sin(ka) \sin(kx) \right\}. \quad (10.69)$$

Начальное условие есть суперпозиция стационарных состояний,

$$\Psi_0(x) = \int_0^\infty dk C(k) \psi_k(x), \quad (10.70)$$

и решение задачи зависимости от времени даётся выражением

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dk C(k) \psi_k(x) e^{-i\hbar k^2 t / 2m}. \quad (10.71)$$

Для нахождения коэффициентов $C(k)$, мы воспользуемся ортогональностью набора $\psi_k(x)$. Их удобно нормировать как

$$\int_{-a}^\infty dx \psi_{k'}(x) \psi_k(x) = \delta(k - k'). \quad (10.72)$$

С этой нормировкой,

$$C(k) = \int_{-a}^\infty dx \Psi_0(x) \psi_k(x), \quad (10.73)$$

или, используя явный вид $\psi_k(x)$,

$$C(k) = A(k) \frac{n\pi \sqrt{a/2}}{(ka)^2 - (n\pi)^2} \sin(ka), \quad (10.74)$$

с полюсами соответствующими энергиям состояний, которые были бы связанными в ящике (резонансы) Вычисляя $A(k)$ соответствующие нормировке (10.72) функций (10.69), мы сталкиваемся в области $x > 0$ со следующими двумя сингулярными интегралами,

$$\int_0^\infty dx \sin(k'x) \sin(kx) = \frac{\pi}{2} [\delta(k' - k) - \delta(k' + k)] \quad (10.75)$$

(здесь достаточно выразить подинтегральное выражение через экспоненты), и

$$\frac{1}{k'} \int_0^\infty dx \cos(kx) \sin(k'x) + \frac{1}{k} \int_0^\infty dx \cos(k'x) \sin(kx) = \pi^2 \delta(k) \delta(k'), \quad (10.76)$$

где правая часть очевидно имеет вид $Z(k) \delta(k - k')$, и интегрируя обе части по k' и пользуясь интегралом Френеля находим $Z(k) = \pi^2 \delta(k)$. Из этой алгебры,

$$A(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k}{[(ka)^2 + kaV \sin(2ka) + V^2 \sin^2(ka)]^{1/2}}. \quad (10.77)$$

Перекрытие начального состояния с состоянием в момент времени t даётся

$$\langle \Psi_0 | \Psi(t) \rangle = \int_0^\infty dk C^2(k) e^{-i\hbar k^2 t / 2m}. \quad (10.78)$$

Функция $A^2(k)$ имеет бесконечное число полюсов в комплексной плоскости k ; они дают экспоненциально падающие члены в функции перекрытия (10.78). После обсуждавшейся ранее начальной стадии, полюс ближайший к действительной оси будет определять "нормальный" экспоненциальный распад. Однако, в пределе $t \rightarrow \infty$, экспонента в (10.78) быстро осциллирует и основной вклад будет давать область *малых волновых векторов*, $ka \ll 1$. поскольку тогда $C^2(k) \propto (ka)^2$, этот предел определяется интегралом

$$\int_0^\infty dk e^{-i\hbar k^2 t / 2m} (ka)^2 \propto t^{-3/2}, \quad (10.79)$$

который получается при введении новой переменной $q = k \sqrt{\hbar t / 2m}$. Тогда *вероятность выживания* ведёт себя как

$$P(t) \propto \frac{\text{const}}{t^3}. \quad (10.80)$$

Как видно из решения, не экспоненциальный распад в пределе больших времён есть следствие существования нижней границы энергетического

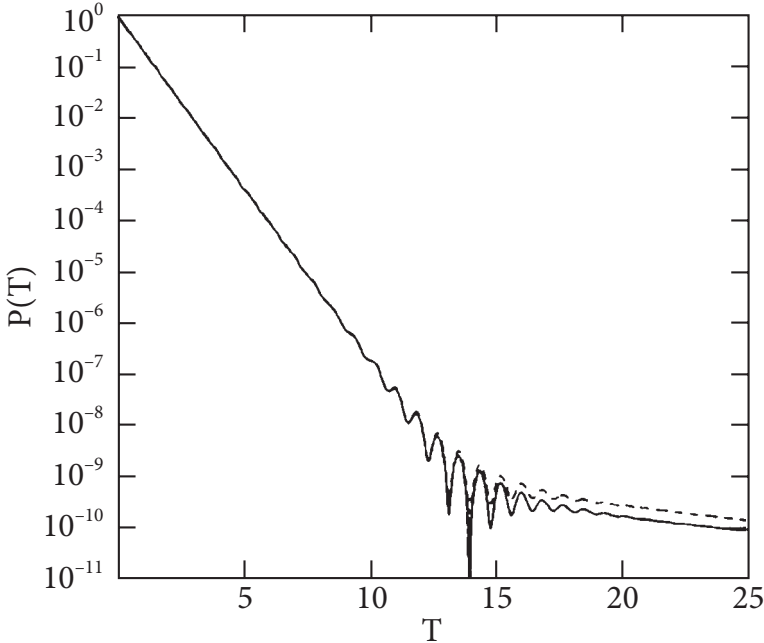


Рис. 10.3. Зависимость от времени распада в модели задачи 10.2 [30].

спектра $E = 0$ в этой модели. Рис. 10.3 показывает полную временную зависимость распада; $T = \hbar^2 t / 2ma^2$. Сплошная линия обозначает вероятность выживания, а пунктирная линия обозначает связанную с ней вероятность нахождения частицы внутри ящика, $\int_{-a}^0 dx |\Psi(x, t)|^2$, которая ведёт себя почти так же, но слегка превышает $P(t)$ поскольку она включает вероятность возвращения в ящик, но в состояния отличные от начального.

10.8 Резонансное сечение

Нестабильное состояние может приближённо рассматриваться как принадлежащее дискретному спектру, если его время жизни достаточно велико или соответствующая ширина очень узкая. Дискретный спектр может быть выделен, если неопределённость энергии состояний меньше, чем среднее расстояние между уровнями D , $\Delta E \sim \hbar/\tau < D$. Это значит, что уровни не перекрываются,

$$\kappa \equiv \frac{\Gamma}{D} < 1. \quad (10.81)$$

Волновой пакет временно захваченный в дискретный спектр с расстоянием между уровнями $\sim D$, может быть приближённо представлен как $\sum_n \exp[(-2\pi i/\hbar)nDt]\psi_n$. Он (также приближённо) воспроизводит себя с периодом *возврата* или *времени Вайскопфа*, \hbar/D . Условие (10.81) означает, что время жизни внутри системы превышает время возврата,

$$\tau \sim \frac{\hbar}{\Gamma} > t_r \sim \frac{\hbar}{D}. \quad (10.82)$$

Значение $\kappa \approx 1$ является границей между двумя физически различными динамическими режимами, слабая связь с континуумом, когда $\kappa \ll 1$ и спектр состоит из изолированных квазидискретных уровней и сильная связь, когда $\kappa \gg 1$ и состояния перекрываются. Долгоживущие состояния во многих отношениях близки к истинно стационарным и поэтому их часто называют *квазистационарными*.

Нестабильные состояния рождаются в различных реакциях и, через некоторое время, распадаются обратно в континуум. Они изучаются в процессах возбуждения и девозбуждения. В экспериментах по рассеянию долгоживущие состояния видны как узкие резонансы в сечении, как функции энергии. В неперекрывающемся режиме параметризация Брейта-Вигнера, (10.58), может быть достаточно хорошим приближением. Однако, такое феноменологическое описание обычно не входит в детали внутренней структуры резонансных состояний. Мы рассмотрим область энергий, где в сечении доминируют изолированные резонансы с *комплексной энергией* $\mathcal{E} = E_r - (i/2)\Gamma_r$.

Будем строить амплитуду T^{ba} для процесса $a \rightarrow b$ идущего через изолированный резонанс r по аналогии с теорией возмущений. Здесь нам нужны процессы как минимум второго порядка, $a \rightarrow r \rightarrow b$. Описание такого двухступенчатого процесса должно включать входную амплитуду $\langle r|A|a\rangle$, выходную амплитуду $\langle b|A|r\rangle$, которые пропорциональны соответствующим матричным элементам полного гамильтониана между состояниями канала и промежуточными состояниями (точное соответствие зависит от нормировки волновых функций в континууме), и энергетический знаменатель, разность между начальной энергией E_a в канале a , (10.2), и энергией промежуточного состояния. В противоположность нормальной теории возмущений в дискретном спектре, последняя энергия должна быть заменена комплексной энергией, потому что состояние нестабильно и не имеет определённой реальной энергии. Введём для краткости обозначение для амплитуды перехода $A_r^b \equiv \langle b|A|r\rangle$. Тогда, амплитуда реакции при энергии

$E = E_a$ принимает Брейт-Вигнеровский вид,

$$T^{ba}(E) = A_r^b \frac{1}{E - E_r + (i/2)\Gamma_r} A_r^{a*}. \quad (10.83)$$

. С общим размерным фактором, как в (10.17-10.19), мы получаем эффективное сечение пропорциональное квадрату модуля амплитуды (10.83),

$$\sigma^{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \left| \frac{A_r^b A_r^{a*}}{E_a - E_r + (i/2)\Gamma_r} \right|^2. \quad (10.84)$$

При такой нормировке амплитуды A_r^a имеют размерность корня квадратного из энергии. В общем случае они зависят от энергии реакции, $E = E_a$, через волновые функции в континууме. Они должны исчезать на соответствующих порогах. Однако, для узких резонансов далеко от порогов соответствующих каналов, Однако, для узких резонансов и далеко от порогов соответствующих каналов явная зависимость от энергии в энергетическом знаменателе является наиболее значимой потому что амплитуды и кинематические факторы (функции от k_a и k_b) почти константы внутри энергетических интервалов меньших, чем расстояние между резонансами или от резонанса до порога.

Мы построили БВ-формулу "руками". Главная её особенность это резонансное поведение, как в (10.58) вокруг энергии E_r . Энергетическая ширина наблюдаемого сечения это величина Γ_r , прямо связанная с временем жизни промежуточного состояния. Отметим, что резонансное усиление видно при реальной энергии реакции, в то время как полюс амплитуды расположен в комплексной плоскости. Чем меньше ширина, тем ближе резонансный полюс к действительной оси, тем выше максимум сечения $\propto \Gamma_r^{-2}$ в точке резонанса $E = E_r$. Резонанс виден в любом канале b связанным с долгоживущим промежуточным состоянием r ненулевой амплитудой A_r^b .

10.9 Унитарность и сверх-излучение

Резонансное поведение в нашем феноменологическом подходе определялось положением полюс \mathcal{E}_r в нижней части комплексной плоскости энергии и набором амплитуд A_r^a для всех открытых каналов a связанных с резонансным внутренним состоянием. Однако, эти параметры не могут принимать произвольных значений. Как мы видели в пороговой области, требование унитарности налагает ограничения на элементы матрицы рассеяния.

Давайте проверим, выполняется ли это требование для используемой параметризации, которую можно представить как

$$T^{ba} = A_r^b \mathcal{G} A_r^{a*}, \quad (10.85)$$

где *пропагатор* при данной действительной энергии E ,

$$\mathcal{G}(E) = \frac{1}{E - \mathcal{E}_r} = \frac{1}{E - E_r + (i/2)\Gamma_r}, \quad (10.86)$$

удовлетворяет очевидному тождеству

$$\text{Im } \mathcal{G} \equiv \frac{1}{2i}(\mathcal{G} - \mathcal{G}^*) = -\frac{\Gamma_r}{2} \mathcal{G}^* \mathcal{G}. \quad (10.87)$$

Перемножая матрицы T и T^\dagger и учитывая (10.87), мы видим, что условие унитарности (10.23) требует

$$\sum_c |A_r^c|^2 = \Gamma_r. \quad (10.88)$$

Ширина Γ_r , будучи обратно пропорциональна времени жизни резонанса, даёт полную скорость перехода из резонанса r во все разрешённые каналы распада. Поэтому, величины A_r^c должны интерпретироваться как *парциальные ширины* резонанса r по отношению к данной моде распада (канал c),

$$\Gamma_r^c = |A_r^c|^2, \quad \Gamma_r = \sum_c \Gamma_r^c. \quad (10.89)$$

Если частица b может быть испущена с оставлением ядра остатка B в различных конечных состояниях B_i , то каждому такому состоянию формально соответствует конкретный канал $b_i \equiv (b + B_i)$. Тогда мы можем найти полную *ширину испускания* для частицы b как сумму по всем возможным состояниям ядра остатка,

$$\Gamma_r(b) = \sum_{b_i} \Gamma_r^{b+B_i}. \quad (10.90)$$

С возрастанием энергии выше порога ширины нестабильных состояний растут вместе с доступным фазовым объёмом в континууме. Соотношение (??) перестаёт выполняться и резонансы начинают *перекрываться*. В этом режиме появляются новые явления: статистические (*Эриксоновские*) флуктуации сечений из-за хаотических фаз интерферирующих резонансов и аналог оптического *сверх-излучения*, раздел 2.9. Со связью

квазистационарных состояний и континуума выражаемой амплитудами A_r^c , эти состояния приобретают новый механизм связи между собой аналогичный взаимодействию через *яркое состояние*, см. т.1, разделы 10.7 и 10.8. Это взаимодействие между состояниями k и l может быть описано неэрмитовой добавкой к внутреннему гамильтониану,

$$\tilde{H}_{kl} = -\frac{i}{2} \sum_c (\text{open}) A_k^{c*} A_l^c. \quad (10.91)$$

Грубо говоря, система может виртуально распасться из состояния l в канал c и затем вернуться обратно в другое состояние k , потому что они перекрываются и их энергии неопределены внутри ширин. Для изолированных резонансов важен только диагональный член $k = l$ и эффективный гамильтониан (10.91) ведёт к комплексной энергии в знаменателе (10.86) с полной шириной одного резонанса даваемой (10.88). Формальный вывод эффективного резонанса можно найти в книге [38].

В пределе сильного перекрытия, когда параметр (10.81) велик $\kappa \geq 1$, анти-эрмитовский член (10.91) играет ведущую роль в пропагаторе (10.86), и основное взаимодействие между внутренними состояниями происходит через континуум. Подобно сверх-излучению из-за связи кубитов через общее поле излучения, это взаимодействие приводит к реструктуризации ширин. В результате, несколько состояний приобретают значительную часть полной суммарной ширины, а оставшиеся (*захваченные*) состояния возвращаются к режиму без перекрытия. В сечении реакции широкое состояние видно как огибающая узких резонансов. Число широких состояний равно числу ненулевых собственных значений матрицы \tilde{H} , которое равно числу открытых каналов. В этом пределе решение динамической задачи аналогично тому, как это делалось для эрмитовского факторизованного гамильтониана в т.1, раздел 10.8, но в данном случае коллективные состояния концентрируют распадную ширину, а не силу мультипольных переходов (сдвиг вдоль мнимой оси в комплексной плоскости энергий). Контригра эриксоновских флуктуаций против сверх-излучательных переходов играет важную роль в процессах передачи сигналов через различные квантовые системы. Детальное обсуждение этих вопросов выходит за рамки книги.

10.10 Угловой момент и чётность

В нашем рассмотрении мы не учитывали вырождение из-за возможности различных проекций углового момента. Полный угловой момент J

в системе центра масс сохраняется и поэтому равен угловому моменту промежуточного состояния ("спину резонанса"),

$$J = J^a = J_r = J^b. \quad (10.92)$$

Проекция $J_z = M$ полного углового момента на ось квантования также сохраняется. Состояния с различными M имеют одинаковую энергию, т.е. мы фактически имеем $(2J + 1)$ вырожденных резонансных состояний с одинаковыми резонансными свойствами, которые не зависят от ориентации системы как целое.

Квантовое число M измеримо, так что процессы соответствующие ортогональным состояниям с различными M не интерферируют. В эксперименте без регистрации M и поляризационных состояний начальных частиц a (спин J_a) и A (спин J_A), мы должны суммировать по M и усреднять некогерентную сумму резонансных сечений для разных M по начальным проекциям. Это даёт

$$\sigma^{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{2J + 1}{(2J_a + 1)(2J_A + 1)} \left| \frac{A_{rJ}^b A_{rJ}^{a*}}{E - E_{rJ} + (i/2)\Gamma_{rJ}} \right|^2, \quad (10.93)$$

где полный угловой момент J указан отдельно, в дополнение к другим квантовым числам r резонанса. Вводя парциальные ширины (10.89), мы получаем

$$\sigma^{ba} = \frac{\pi}{k_a^2} \frac{2J + 1}{(2J_a + 1)(2J_A + 1)} \frac{\Gamma_{rJ}^b \Gamma_{rJ}^a}{(E - E_{rJ})^2 + \Gamma_{rJ}^2/4}. \quad (10.94)$$

Зависящий от спина статистический фактор здесь равен вероятности найти величину полного углового момента при векторном сложении $\mathbf{J} = \mathbf{J}_a + \mathbf{J}_A$ равную резонансному значению J .

Если мы не рассматриваем распады за счёт слабых взаимодействий, пространственная чётность Π также сохраняется. Она определяется внутренними чётностями частиц и чётностью волновой функции относительного движения, т.е. орбитальным моментом относительного движения в данном канале:

$$\Pi = \Pi_a \Pi_A (-)^{\ell_a} = \Pi_r = \Pi_b \Pi_B (-)^{\ell_b}. \quad (10.95)$$

10.11 Узкий резонанс как составная система

В резонансе, $E = E_{rJ}$, сечения всех каналов выражаются простыми соотношениями, которые имеют очевидный вероятностный смысл,

$$\sigma^{ba} = \frac{4\pi}{k_a^2} \frac{2J+1}{(2J_a+1)(2J_A+1)} \frac{\Gamma_{rJ}^b \Gamma_{rJ}^a}{\Gamma_{rJ}^2}, \quad (10.96)$$

будучи пропорциональными произведению вероятности захвата $\Gamma_{rJ}^a/\Gamma_{rJ}$ и вероятности распада $\Gamma_{rJ}^b/\Gamma_{rJ}$. Тогда входной и выходной каналы *статистически независимы*. Конечно, это было изначально заложено в приближении изолированного резонанса (10.83).

Идея статистической независимости является главной в теории *составного ядра* (Н. Бор, 1936), или составной промежуточной системы в общем случае. Физически мы ожидаем справедливость такой картины если резонанс достаточно долгоживущий, чтобы было возможно достичь состояния близкого к тепловому равновесию, когда память о входном канале теряется и распад на разные выходные каналы определяется статистически. Отметим, что в случае одноканального (упругого) рассеяния, парциальная и полная ширины совпадают и резонансное сечение не содержит никакой динамической информации; оно определяется, за исключением спиновых статистических факторов, начальной длиной волны $\lambda_a \propto k_a^{-1}$.

В окрестности изолированного резонанса все каналы $a \rightarrow b$ демонстрируют одинаковое Брейт-Вигнеровское поведение (10.94). Отношение сечений для различных каналов есть просто отношение парциальных ширин,

$$\frac{\sigma^{ba}}{\sigma^{ca}} = \frac{\Gamma_{rJ}^b}{\Gamma_{rJ}^c}. \quad (10.97)$$

Для данного входного канала a , отношение (полное неупругое)/(упругое) тогда равно

$$\frac{\sigma_{\text{inel}}}{\sigma_{\text{el}}} = \frac{\sum_{b \neq a} \sigma^{ba}}{\sigma^{aa}} = \frac{\sum_{b \neq a} \Gamma_{rJ}^b}{\Gamma_{rJ}^a} \equiv \frac{\Gamma_{rJ} - \Gamma_{rJ}^a}{\Gamma_{rJ}^a}. \quad (10.98)$$

В терминах полного сечения это может быть записано (опуская очевидные индексы) как отношение вероятностей

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{tot}} \frac{\Gamma_{\text{el}}}{\Gamma}, \quad \sigma_{\text{inel}} = \sigma_{\text{tot}} \frac{\Gamma_{\text{inel}}}{\Gamma}, \quad \Gamma = \Gamma_{\text{el}} + \Gamma_{\text{inel}}. \quad (10.99)$$

Одинаковое положение пика в сечениях в разных каналах свидетельствует, что мы имеем дело с одним изолированным резонансом.

Этот подход может быть обобщён на учёт пороговых эффектов важных для медленных частиц. В этих случаях парциальные и полные ширины не константы, а плавные функции энергии или волнового вектора в соответствующем канале. Рассмотрим, например, реакцию при низкой энергии ε_a во входном канале. Тогда, как мы знаем, упругая ширина в ℓ -той парциальной волне должна зависеть от энергии $\propto k_a^{2\ell+1} \propto \varepsilon_a^{\ell+1/2}$. Поэтому можно определить не зависящую от энергии *приведённую* ширину $\gamma_{rJ}^{a;\ell}$ согласно

$$\Gamma_{rJ}^{a;\ell} = \gamma_{rJ}^{a;\ell} \left(\frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_r} \right)^{\ell+1/2}, \quad (10.100)$$

где $\varepsilon_r^a = E_r - E_a^{\text{intr}}$ есть кинетическая энергия в резонансе. Поскольку в нашем подходе все каналы входят на равных основаниях, за исключением различия в плотности конечных состояний, которое эффективно учитывается фактором $k_a^{-2} \propto \varepsilon_a^{-1}$, подобная зависимость от энергии $\propto \varepsilon_b^{\ell+1/2}$ появляется и в парциальной ширине испускания медленных частиц в ℓ -той парциальной волне. Как мы помним из теории рассеяния, подавление высших парциальных волн идёт от центробежного барьера и параметром малости является kR , где R характеризует радиус взаимодействия.

10.12 Интерференция резонанса и потенциального рассеяния

Узкий резонанс соответствует квазистационарному состоянию, которое почти связано взаимодействиями внутри составной системы. На практике, резонансы в сечении наложены на плавный фон. Плавная часть сечения обязана процессам, которые не влекут образование долгоживущих внутренних состояний. Слабая зависимость от энергии фона показывает, что соответствующие взаимодействия имеют малый временной масштаб (*прямые процессы*). В более продвинутой микроскопической теории это может рассматриваться как признак присутствия высокоэнергичных резонансов, от которых видны только низкоэнергетические хвосты, или очень широких (короткоживущих, таких как сверх-излучательных) возбуждённых состояний, которые теряют свой резонансный характер. Потенциальное рассеяние также может приводить к тем же конечным состояниям, что и распад узкого резонанса и все эти процессы *интерферируют*.

Для простоты мы рассмотрим один s -волновой резонанс. Упругое рассеяние состоит из резонансной части и "потенциальной" части, которая включает все вклады с плавной зависимостью от энергии. Эти части долж-

ны складываться когерентно, на уровне *амплитуд*,

$$f_{\text{el}} = f_{\text{res}} + f_{\text{pot}}. \quad (10.101)$$

Упругое сечение содержит интерференционный вклад,

$$\sigma_{\text{el}} = 4\pi |f_{\text{el}}|^2 = 4\pi |f_{\text{res}} + f_{\text{pot}}|^2. \quad (10.102)$$

Два вклада в (10.101) различимы по их энергетической зависимости; мы предполагаем, что резонансная часть f_{res} может быть распознана по её брейт-вигнеровской форме (10.93).

Разложение на резонансную и потенциальную части естественно возникает из феноменологического анализа S -матрицы, если последняя имеет резонансный полюс в комплексной плоскости энергии. Радиальная s -волновая функция в асимптотической области $r > R$ входного канала a выражается, см. (8.16), с помощью матричного элемента $S \equiv S_0^{aa}$ как

$$u(r) \propto e^{-ikr} - S e^{ikr}. \quad (10.103)$$

Зависящая от энергии величина S определяет оба, упругое (10.17) и полное неупругое (10.19) сечения. Полюса их аналитического продолжения на мнимую ось $k = ik$ дают энергии возможных связанных состояний, см. раздел 10.4. Теперь мы ищем квазистационарные состояния связанные с полюсами при *комплексной* энергии \mathcal{E} .

Если бы мы могли создать в реальности состояние с этой комплексной энергией, то соответствующий волновой вектор k был бы также комплексным. Для долгоживущего состояния, $\Gamma \ll E_0$,

$$k = \sqrt{\frac{2\mu_a}{\hbar^2} \left(E_0 - \frac{i}{2}\Gamma \right)} \approx k_0 \left(1 - i \frac{\Gamma}{4E_0} \right), \quad k_0 = \sqrt{\frac{2\mu_a E_0}{\hbar^2}}. \quad (10.104)$$

В полюсе S мы можем пренебречь первым членом в (10.103), который даёт падающую волну. Оставшаяся расходящаяся волна даёт растущую на больших расстояниях интенсивность,

$$e^{ikr} \approx e^{ik_0 r} e^{(\mu_a \Gamma / 2 \hbar^2 k_0) r}. \quad (10.105)$$

Эта ненормируемая функция описывает волну частицы испущенной из нестабильного состояния и движущейся из начала координат со скоростью $v = \hbar k_0 / \mu_a$. Действительно, восстановив зависящий от времени фактор (10.58), мы имеем в точке комплексного полюса

$$u(r) \propto e^{ik_0 r} e^{-(i/\hbar)E_0 t} e^{(\Gamma/2\hbar)[(r/v)-t]}, \quad (10.106)$$

волновой пакет движущийся наружу со скоростью v .

В задаче рассеяния элементы S -матрицы должны находиться при сшивке внешней волновой функции (10.103) с реальным решением уравнения Шрёдингера при той же положительной энергии E внутри области взаимодействия $r < R$. Фактически, мы должны знать только логарифмическую производную внутренней волновой функции на поверхности сшивки $r = R$. Удобно определить безразмерную логарифмическую производную

$$\lambda(E) = R \left(\frac{1}{u} \frac{du}{dr} \right)_{r=R}. \quad (10.107)$$

Предполагая эту функцию известной в точке $r = R - 0$, мы можем записать условие сшивки функции (10.103)

$$\lambda(E) = -ikR \frac{1 + Se^{2ikR}}{1 - Se^{2ikR}} \rightsquigarrow S = -e^{-2ikR} \frac{kR - i\lambda}{kR + i\lambda}. \quad (10.108)$$

Если бы не было неупругих каналов, $\lambda(E)$ была бы действительной и уравнение (10.108) немедленно показало бы, что $|S| = 1$ как и должно быть в упругом рассеянии (8.2). В общем многоканальном случае $\lambda(E)$ есть комплексная функция, которую можно разделить на действительную и мнимую части,

$$\lambda(E) = \lambda_1(E) - i\lambda_2(E) \rightsquigarrow S = -e^{-2ikR} \frac{(kR - \lambda_2) - i\lambda_1}{(kR + \lambda_2) + i\lambda_1}. \quad (10.109)$$

В присутствии поглощения (неупругие каналы), $|S| < 1$; легко видеть, что это неравенство влечёт $\lambda_2 > 0$. Используя (10.17) и (10.19), мы выражаем упругое и неупругое сечения,

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} |1 - S|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \left| e^{-2ikR} \frac{kR}{\lambda - ikR} - e^{-ikR} \sin kR \right|^2, \quad (10.110)$$

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2} (1 - |S|^2) = \frac{4\pi}{k^2} \frac{kR\lambda_2}{(kR + \lambda_2)^2 + \lambda_1^2}. \quad (10.111)$$

Глядя на выражение (10.110), естественно сделать разложение (10.101, 10.102) вводя амплитуду потенциального рассеяния, в согласии со стандартным определением (9.12),

$$f_{\text{pot}} = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0, \quad \delta_0 = -kR. \quad (10.112)$$

Фаза рассеяния δ_0 была бы единственным эффектом рассеяния на непроницаемой сфере радиуса R , см. (8.41). В нашем случае возможно проникновение в область взаимодействия и это есть источник появления квазистационарных состояний спрятанный в *резонансной* части амплитуды рассеяния,

$$f_{\text{res}} = \frac{1}{k} e^{2i\delta_0} \frac{kR}{\lambda - ikR}. \quad (10.113)$$

Заметим, что S -матрица потенциального рассеяния, $S_{\text{pot}} = e^{2i\delta_0}$, входит в резонансную амплитуду как дополнительный фактор, потому что рассеяние на квазистационарном уровне с необходимостью включает свободное движение вне сферы взаимодействия, которое связано с фазой рассеяния $\delta_0 = -kR$.

Для нахождения условия существования узкого резонанса рассмотрим область низких энергий, $kR \ll 1$, в которой доминирует s -волновое рассеяние. Резонансная часть (10.113) может быть значительной только если комплексная величина λ тоже мала, $|\lambda| \sim kR$. Мы бы имели точный резонанс (полнос амплитуды f_{res}), если бы было $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = -kR$. Как мы уже обсуждали, это соответствовало бы квазистационарному состоянию, достигаемому в упругом рассеянии. Однако это невозможно в физической области в присутствии неупругих каналов, когда должно быть $\lambda_2 \geq 0$. Тем не менее, для малых $\lambda_2 > 0$ мы всё ещё можем видеть узкий резонанс. Действительно, пусть E_0 есть реальная часть энергии, где $\lambda_1(E_0) = 0$. В окрестности этой энергии

$$\lambda_1(E) \approx \left(\frac{d\lambda_1}{dE} \right)_{E=E_0} (E - E_0) + \dots \equiv \lambda'_1 (E - E_0) + \dots \quad (10.114)$$

Предполагая, что $\lambda'_1 < 0$, мы можем определить ширины следующим образом, сравните с (10.99),

$$\Gamma_{\text{el}} = -\frac{2kR}{\lambda'_1}, \quad \Gamma_{\text{inel}} = -\frac{2\lambda_2}{\lambda'_1}, \quad \Gamma = \Gamma_{\text{el}} + \Gamma_{\text{inel}}. \quad (10.115)$$

Тогда, резонансная часть упругой амплитуды (10.113) приобретает брейт-вигнеровский вид,

$$f_{\text{res}} = -\frac{1}{k} e^{2i\delta_0} \frac{(1/2)\Gamma_{\text{el}}}{E - E_0 + (i/2)\Gamma}, \quad (10.116)$$

с полюсом в комплексной плоскости. Это немедленно даёт брейт-вигнеровское резонансное выражение для неупругого сечения (10.111),

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2} \frac{\Gamma_{\text{el}}\Gamma_{\text{inel}}}{(E - E_0)^2 + (1/4)\Gamma^2}, \quad (10.117)$$

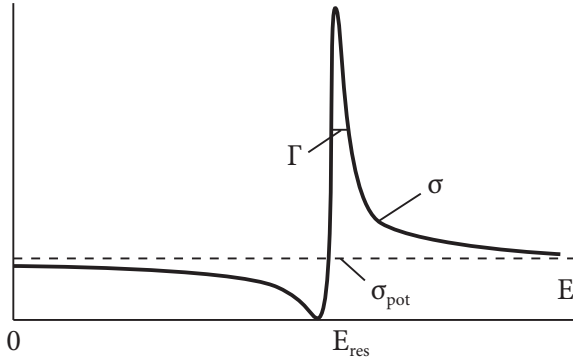


Рис. 10.4. Интерференционная картина потенциального и резонансного рассеяния.

которое совпадает с (10.94) после суммирования по всем неупругим каналам b (здесь мы не учитываем спиновых факторов).

В упругом канале сечение даётся интерференцией (10.102); в непосредственной близости к резонансу во многих случаях можно пренебречь потенциальным рассеянием и вернуться к результатам раздела 10.6. Присутствие потенциальной части плавно меняющейся с энергией искажает форму брейт-вигнеровского резонанса. Из-за интерференции форма теряет симметрию относительно резонансной энергии E_0 . Рис. 10.4 показывает типичную наблюдаемую картину. Легко видеть, что упругая фаза рассеяния для резонанса интерферирующего с гладким потенциальным рассеянием имеет универсальную энергетическую зависимость вблизи резонансной энергии,

$$\delta = \bar{\delta} - \arctan \frac{\Gamma}{2(E - E_0)}. \quad (10.118)$$

Если $\bar{\delta}$ фаза потенциального рассеяния вдали от резонанса (её изменение мало внутри ширины резонанса), полная фаза меняется на π при прохождении резонанса.

Литература

- [1] Berry M. // Proc. R. Soc. Lond. A. — 1984. — Vol. 392. — P. 45.
- [2] Otten E., Weinheimer C. // Rep. Prog. Phys. — 2008. — Vol. 71. — P. 086201.
- [3] Jaynes E., Cummings F. // Proc. IEEE. — 1963. — Vol. 51. — P. 89.
- [4] Shore B., Knight P. // J. Mod. Opt. — 1993. — Vol. 40. — P. 1195.
- [5] Bužek V., Jex I. // I. Mod. Opt. — 1989. — Vol. 36. — P. 1427.
- [6] Dicke R. // Phys. Rev. — 1954. — Vol. 93. — P. 99.
- [7] N. Skribanowitz I.P. Herman J. M., Feld M. // Phys. Rev. Lett. — 1973. — Vol. 30. — P. 309.
- [8] Feynman R. Photon-Hadron Interactions. — Reading : Benjamin, 1972.
- [9] Fermi E. Nuclear Physics. — Chicago, 1950.
- [10] Akhiezer A., Berestetsky V. Quantum Electrodynamics. — Interscience, N.Y., 1965.
- [11] Landau L., Lifshitz E. Course of Theoretical Physics. Classical Theory of Fields. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 1996. — Vol. 2.
- [12] Weinberg S. Quantum Field Theory. — Cambridge University Press, 1995. — Vol. 1.
- [13] Lamoreaux S. // Phys. Rev. Lett. — 1997. — Vol. 78. — P. 5.
- [14] Casimir H., Polder D. // Phys. Rev. — 1948. — Vol. 73. — P. 360.
- [15] Breuer H.-P., Petruccione F. The Theory of Open Quantum Systems. — Oxford University Press, 2002.

- [16] M. Bordag U. M., Mostepanenko M. // Phys. Rep. — 2001. — Vol. 353. — P. 1.
- [17] Lamb W., Retherford R. // Phys. Rev. — 1947. — Vol. 72. — P. 241.
- [18] Bethe H., Salpeter E. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms. — Berlin : Springer, 1957.
- [19] Landau L., Lifshitz E. Course of Theoretical Physics. Electrodynamics of Continuous Media. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 2000. — Vol. 8.
- [20] Landau L., Lifshitz E. Course of Theoretical Physics. Mechanics. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 2003. — Vol. 1.
- [21] Epelbaum E. // Prog. Part. Nucl. Phys. — 2006. — Vol. 57. — P. 654.
- [22] Bohr A., Mottelson B. Nuclear Structure. — Singapore : World Scientific, 1998. — Vol. 1 and 2.
- [23] Landau L., Lifshitz E. Course of Theoretical Physics. Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory. — Oxford : Butterworth-Heinemann, 2003. — Vol. 3.
- [24] Pilkuhn H. Relativistic Particle Physics. — Springer, 1979.
- [25] Базь А. И. // ЖЭТФ. — 1959. — Т. 36. — С. 1762.
- [26] Misra B., Sudarshan E. // J. Math. Phys. — 1977. — Vol. 18. — P. 756.
- [27] W.H. Itano D.J. Heinzen J. B., Wineland D. // Phys. Rev. A. — 1990. — Vol. 41. — P. 2295.
- [28] M.S. Fischer B. G.-M., Raizen M. // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 87. — P. 040402.
- [29] Hotta M., Morikawa M. // Phys. Rev. A. — 2004. — Vol. 69. — P. 052114.
- [30] D.A. Dicus W.W. Repko R. S. // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 65. — P. 032116.

[illegible]