

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

530.145.6

«ВСТРЯХИВАНИЕ» КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ И ХАРАКТЕР СТИМУЛИРОВАННЫХ ИМ ПЕРЕХОДОВ

А. М. Дыхне, Г. Л. Юдин

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	377
2. Теория внезапных возмущений	380
а) «Встряска» типа рассеяния при $\xi \equiv 0$ (380). б) Рассеяние в общем случае ($\xi \neq 0$) (383). в) «Встряхивание» с изменением гамильтониана системы (385). г) Пример: переворачивание спина в магнитном поле (386).	
3. «Встряхивание» при почти резонансном внешнем воздействии на квантовую систему	387
4. «Встряхивочный» параметр N	389
5. Возбуждение осциллятора	392
а) Гармонический осциллятор (392). б) Параметрическая «встряска» гармонического осциллятора при произвольной температуре (394). в) Негармонические осцилляторы (395).	
6. «Вытряхивание» электронов из атомных оболочек	396
а) Столкновения нейтронов с легкими атомами (396). б) Комптон-эффект на слабосвязанном электроне (398).	
7. Другие процессы столкновений	404
а) Излучение ядра в молекуле или кристалле (404). б) Столкновения молекул с электронами и тяжелыми частицами (405).	
Цитированная литература	406

1. ВВЕДЕНИЕ

Вероятности любых переходов в квантовомеханической системе, подвергающейся какому-либо внешнему воздействию, характеризуются в первую очередь интервалом времени, в течение которого соответствующее взаимодействие осуществляется. В общем случае изменение взаимодействия во времени может происходить по произвольному закону. При возбуждении, скажем, атома пролетающей тяжелой заряженной частицей скорость изменения взаимодействия между ними зависит от скорости налетающей частицы. В нерезонансном рассеянии γ -кванта время взаимодействия определяются частотой кванта, в резонансном рассеянии — временем жизни возбужденного состояния и т. д.

Это характерное время τ , которое мы будем называть временем столкновения, всегда важно не само по себе, а в сравнении с периодом $2\pi/\omega$, свойственным той квантовой системе, переходы в которой нас интересуют. Адиабатические взаимодействия ($\omega\tau \gg 1$) приводят к малым (экспоненциально или степенным образом) вероятностям квантовых переходов в состояниях с дискретным спектром. Наиболее «подходящим» для возбуждения является противоположный предельный случай — случай вне-

запных возмущений ($\omega\tau \ll 1$), когда вероятность перехода в любое другое состояние может стать близкой к единице.

Из всевозможных «встрясочных» процессов удобно выделить два крайних типа: один раз гамильтониан, описывающий квантовую систему, резко изменяется за времена τ , малые по сравнению с $1/\omega$ («встряска»

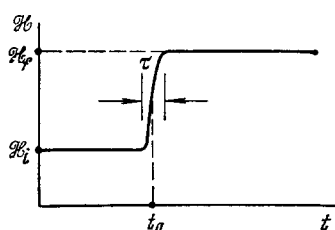


Рис. 1. Схематическое изображение «встряски» типа «включения».

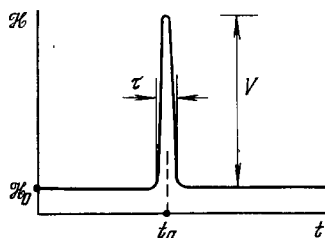


Рис. 2. Схематическое изображение «встряски» типа рассеяния.

типа «включения», рис. 1); в другой ситуации в течение короткого времени τ действует возмущение $V(t)$, а при $t \rightarrow \pm \infty$ полный гамильтониан системы совпадает с невозмущенным гамильтонианом \hat{H}_0 («встряска» типа рассеяния; рис. 2). В общем случае, конечно, может иметь место наиболее сложный тип «встряски» — и со скачком гамильтониана, и с толчком $\hat{V}(t)$ (рис. 3).

Простейший пример «встряски» типа «включения» — попадание электрона в область пространства, где действует сильное внешнее поле¹.

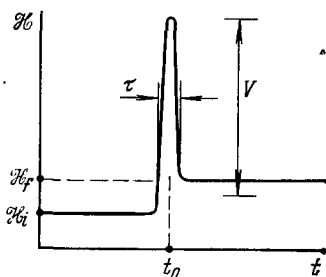


Рис. 3. Схематическое изображение общего случая «встряски».

Отметим, что во «встряске» типа «включения» для того, чтобы вероятности квантовых переходов были заметными, достаточно изменить гамильтониан на величину порядка его самого. Во «встряске» же типа рассеяния для этой цели необходимо иметь большое возмущение $\hat{V}(t)$, чтобы выполнялось условие $V\tau/\hbar \gtrsim 1$.

Классические исследования встрясочных ситуаций связаны главным образом с изучением эффектов атомной структуры в быстрых ядерных реакциях^{2,3}. Интересны также быстрые процессы, которые разыгрываются на атомном и молекулярном уровне. Здесь, в отличие от ядерных реакций, столкновения протекают разнообразнее и красочнее, ибо они более восприимчивы ко всякого рода внешним полям и могут в них сильно меняться.

Несмотря на различную физическую природу тех процессов, которые интерпретируются как «встряска», в них существует много общих черт. Самая главная — это характеристика большинства из них величиной «встрясочного» параметра N , смысл которого мы достаточно подробно обсудим ниже.

Общие закономерности и характерные особенности реальных встрясочных явлений (их перечень, естественно, неограничен) детально могут быть изучены уже на примере взаимодействия слабосвязанного электрона жестким электромагнитным излучением. Сюда в первую очередь относится комптон-эффект на атомном электроны, а также процессы поглоще-

ния, испускания или рассеяния света с участием молекул. Наряду с вопросами о взаимодействии с излучением, которым посвящена значительная часть нашей работы, мы опишем в самых общих чертах, как появляется «встрясочный» параметр и в задачах о столкновениях молекул с быстрыми заряженными частицами. Не претендуя на детальное рассмотрение какого-либо одного из указанных эффектов и не нуждаясь в этом, мы обратим внимание только на встрясочную интерпретацию всего круга задач и будем подходить к каждой из них в отдельности лишь с такой точки зрения.

Параметр N , как видно из дальнейшего анализа, существенно зависит от величины неопределенности в координатах невозмущенной системы δR , которая связана с относительно медленными внутренними движениями. Подчеркнем, что происхождение разброса по координатам физически неважно. Оно может быть обусловлено классическим движением электрона в лазерной волне, квантованным движением в поле атома, молекулы или кристаллической решетки и т. п. В разных ситуациях меняются лишь формулы для вероятностей переходов, характерная же зависимость их от параметра N остается неизменной.

Прежде чем все это продемонстрировать, необходимо, однако, иметь последовательную теорию внезапных возмущений, например, в виде ряда по степеням ωt , с тем, чтобы заведомо можно было указать область применимости «встрясочного» подхода и, в частности, понять, в каких же столкновениях следует ожидать появления такой характеристики, как параметр N . Напомним сначала о том, что было известно по этому поводу до сих пор.

Теория внезапных возмущений построена только для нескольких модельных задач (см., например, ^{2, 4}), обычно же исследуется лишь нулевое приближение для амплитуды перехода по параметру ωt . Во «встряске» типа рассеяния самым интересным является случай произвольных $V\tau/\hbar$. В имеющейся теории ⁵⁻⁸ для нахождения амплитуд переходов при такой «встряске» вводятся два неравноценных предположения о коммутациях

$$[\hat{V}, \hat{\mathcal{H}}_0] \equiv 0, \quad [\hat{V}(t), \hat{V}(t')] \equiv 0$$

(в работе ⁹ формула для амплитуды в нулевом порядке по ωt выводится методом, в котором заложено лишь второе из указанных условий коммутации). Несмотря на эти жесткие требования (условие $[\hat{V}, \hat{\mathcal{H}}_0] \equiv 0$ никогда не выполняется), относительная простота выражения для амплитуды рассеяния в этом приближении способствовала широкому использованию его в работах по изучению колебательно-вращательного возбуждения молекул в столкновениях с электронами и тяжелыми частицами. При этом, поскольку настоящая теория внезапных возмущений отсутствовала, оценивать результаты оставалось исключительно путем численного сопоставления их с другими, более обоснованными расчетами.

В гл. 2 мы изложим теорию внезапных возмущений, избавленную от перечисленных недостатков. Как будет показано, невыполнимое условие $[\hat{V}, \hat{\mathcal{H}}_0] \equiv 0$ при малых ωt совершенно не требуется. При произвольных $V\tau/\hbar$ простота или сложность выражения для амплитуды перехода существенно зависит от того, мал или велик коммутатор

$$\hat{\xi}(t, t') \equiv [\hat{V}(t), \hat{V}(t')]. \quad (1)$$

Простейшее выражение для амплитуды получается в пределе $\xi \rightarrow 0$, чему отвечают наиболее часто используемые модели процессов столкновений. Если же коммутатор (1) не мал, теория намного усложняется

и, вообще говоря, в конечном виде при произвольных $V\tau/\hbar$ она не может быть сформулирована (см. дополнение при корректуре на с. 406).

В ядерной физике имеется хороший пример того, когда потенциал взаимодействия велик, и в то же время отнюдь не мал коммутатор (1). Мы имеем ввиду тензорную часть межкулонного взаимодействия^{10, 11}, пропорциональную оператору

$$\frac{3}{r^2} (\hat{\sigma}_1 \mathbf{r}) (\hat{\sigma}_2 \mathbf{r}) - \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2,$$

$\hat{\sigma}_{1,2}$ — спинные операторы, \mathbf{r} — радиус-вектор между двумя нуклонами. Выбирая произвольную классическую траекторию движения одного нуклона при его рассеянии на другом, легко убедиться, что операторы $(\hat{\sigma}_1 \mathbf{n}) (\hat{\sigma}_2 \mathbf{n})$, взятые в разные моменты времени (от времени зависит направление единичного вектора $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$), не коммутируют между собой.

В атомной физике аналогичным примером является взаимодействие магнитного момента $\hat{\mu}$ с интенсивным магнитным полем. Если поле переменное и вектор $\mathbf{H}(t)$ успевает поменять свое направление за время τ , то потенциал $\hat{V} = \hat{\mu} \mathbf{H}(t)$ не коммутирует сам с собой в различные моменты времени. В этом случае точное выражение для амплитуды перехода не имеет ничего общего с простейшим «встрясочным» результатом, справедливым только в пределе $\xi \rightarrow 0$.

2. ТЕОРИЯ ВНЕЗАПНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

а) «Встряска» типа рассеяния при $\xi \equiv 0$

Предположим, что полный гамильтониан квантовомеханической системы $\hat{\mathcal{H}}$ разбивается на сумму не зависящей от времени части $\hat{\mathcal{H}}_0$ (невозмущенный гамильтониан) и части, обусловленной взаимодействием с внешним полем, $\hat{V}(t)$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}(t).$$

Будем считать, что $\hat{V}(t)$ сосредоточено в интервале времени τ вблизи момента t_0 , а также что операторы $\hat{V}(t)$, взятые в разные моменты времени, коммутируют между собой.

В дальнейшем мы будем различать векторы состояний квантовой системы, записываемые в представлении взаимодействия $|\Psi\rangle$, и в представлении Шрёдингера, $|\Phi\rangle$, и соответствующие унитарные операторы эволюции $\hat{S}(t, t')$ и $\hat{U}(t, t')$, связывающие подобные векторы в разные моменты времени:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{S}(t, t') |\Psi(t')\rangle, \quad (2)$$

$$|\Phi(t)\rangle = \hat{U}(t, t') |\Phi(t')\rangle. \quad (3)$$

В самом общем случае максимально возможное описание квантовомеханической системы достигается при использовании вместо векторов состояний оператора квантовой плотности $\hat{\rho}$ (он же — «статистический оператор», совокупность элементов $\langle s' | \hat{\rho} | s \rangle$ — матрица плотности). Нам будет удобно пользоваться оператором плотности, записанным в представлении взаимодействия:

$$\hat{\rho} = \sum_s |\Psi_s\rangle w_s \langle \Psi_s| \quad (4)$$

(весовые множители w_s определяют вероятности обнаружить систему в различных квантовых состояниях $|\Psi_s\rangle$). Эволюция оператора (4) во времени происходит, очевидно, по закону

$$\hat{\rho}(t) = \hat{S}(t, t') \hat{\rho}(t') \hat{S}^{-1}(t, t'). \quad (5)$$

Оператор временной эволюции $\hat{S}(t, t')$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t, t')}{\partial t} = \hat{W}(t) \hat{S}(t, t') \quad (6)$$

с граничным условием $\hat{S}(t, t) = \hat{I}$, или, что то же самое, интегральному уравнению

$$\hat{S}(t, t') = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt \hat{W}(t) \hat{S}(t, t'); \quad (7)$$

здесь $\hat{W}(t)$ — оператор $\hat{V}(t)$, записанный в представлении взаимодействия:

$$\hat{W}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t\right) \hat{V}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t\right). \quad (8)$$

В терминах векторов состояний, описывающих чистый ансамбль, задача рассеяния ставится следующим образом. Пусть $|i\rangle$ и $|f\rangle$ — начальное и конечное состояния системы, являющиеся собственными функциями гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |i\rangle = E_i |i\rangle, \quad \hat{\mathcal{H}}_0 |f\rangle = E_f |f\rangle. \quad (9)$$

Вероятность перехода из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ в результате действия возмущения $\hat{V}(t)$ определяется квадратом модуля матричного элемента

$$\mathfrak{M}_{fi} = \langle f | \hat{S}(+\infty, -\infty) | i \rangle. \quad (10)$$

Задача рассеяния в случае смешанного ансамбля не может быть сформулирована как задача о квантовых переходах в обычном смысле этого слова. Будем считать, что в начальном состоянии ($t \rightarrow -\infty$) система описывается оператором плотности

$$\hat{\rho}_i \equiv \hat{\rho}(-\infty) = \sum_i |i\rangle w_i \langle i| \quad (11)$$

(сумма берется по всем собственным состояниям невозмущенного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$). Тогда вероятность обнаружить систему в стационарном состоянии $|f\rangle$ невозмущенного гамильтониана при $t \rightarrow +\infty$ дается формулой

$$w_f(i) = \langle f | \hat{\rho}(+\infty) | f \rangle = \langle f | \hat{S}(+\infty, -\infty) \hat{\rho}_i \hat{S}^{-1}(+\infty, -\infty) | f \rangle. \quad (12)$$

Если $\hbar\omega$ — типичные собственные значения $\hat{\mathcal{H}}_0$, а параметр $\omega\tau$ мал, то оператор возмущения в представлении взаимодействия можно разложить в ряд по степеням $\omega\tau$ (здесь $W_n \sim (\omega\tau)^n$):

$$\hat{W}(t) = \hat{W}_0(t) + \hat{W}_1(t) + \hat{W}_2(t) + \dots, \quad (13)$$

$$\hat{W}_0(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0\right) \hat{V}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0\right), \quad (14)$$

$$\hat{W}_1(t) = \frac{t-t_0}{i\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0\right) [\hat{V}(t), \hat{\mathcal{H}}_0] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0\right), \quad (15)$$

$$\hat{W}_2(t) = \frac{1}{2} \left(\frac{t-t_0}{i\hbar}\right)^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0\right) [[\hat{V}(t), \hat{\mathcal{H}}_0], \hat{\mathcal{H}}_0] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0\right), \dots \quad (16)$$

Для решения уравнения (6) выражение для оператора эволюции $\hat{S}(t, t')$ представим также в виде разложения по степеням $\omega\tau$ (здесь $\Delta_n \sim (\omega\tau)^n$):

$$\hat{S}(t, t') = \hat{S}_0(t, t') [\hat{I} + \hat{\Delta}_1(t, t') + \hat{\Delta}_2(t, t') + \dots]. \quad (17)$$

Поскольку в этом пункте предполагается, что $\hat{\xi} \equiv 0$, уравнение (6) с помощью подстановки (13) — (16) интегрируется непосредственно:

$$\begin{aligned} \hat{S}_0(t, t') &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt \hat{W}_0(t) \right] = \\ &= \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0 \right) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt \hat{V}(t) \right] \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0 \right), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\hat{\Delta}_1(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt \hat{S}_0^{-1}(t, t') \hat{W}_1(t) \hat{S}_0(t, t'), \quad (19)$$

$$\hat{\Delta}_2(t, t') = \frac{[\hat{\Delta}_1(t, t')]^2}{2} - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt \hat{S}_0^{-1}(t, t') \hat{W}_2(t) \hat{S}_0(t, t'), \dots \quad (20)$$

В нулевом приближении по $\omega\tau$, когда $\hat{S} \approx \hat{S}_0$, с точностью до несущественного фазового множителя амплитуда перехода

$$\mathfrak{M}_{fi}^0 = \langle f | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}(t) \right] | i \rangle. \quad (21)$$

Соответственно, на языке оператора квантовой плотности, вероятность

$$w_f^0(i) = \langle f | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}(t) \right] \hat{\rho}_i \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}(t) \right] | f \rangle. \quad (22)$$

Отметим особо тот чаще всего встречающийся случай «встряски», где можно считать, что системе в результате столкновения передается определенный импульс $\delta\mathbf{p}$. При таком предположении в нулевом порядке по $\omega\tau$ действие оператора $\hat{S}_0(+\infty, -\infty)$ на функцию $|f\rangle$ сводится лишь к сдвигу на $\delta\mathbf{p}$ в импульсном пространстве:

$$\langle f | \hat{S}_0(+\infty, -\infty) = \langle f | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right). \quad (23)$$

Поэтому (относительно формулы (24) см. также ^{2,12})

$$\mathfrak{M}_{fi}^0 = \langle f | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right) | i \rangle, \quad (24)$$

$$w_f^0(i) = \langle f | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right) \hat{\rho}_i \exp \left(\frac{i}{\hbar} \delta\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right) | f \rangle. \quad (25)$$

Формулы (24), (25) прямо следуют из (21), (22), если положить там

$$\hat{V}(t) = \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{r}, \quad \delta\mathbf{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathbf{f}(t),$$

$\mathbf{f}(t)$ — возмущающая сила.

Если вне интервала времени τ величина $f(t)$ спадает достаточно быстро (скажем, экспоненциально, когда теория возмущений (17) — (20)

по степеням $\omega\tau$ применима в любом порядке), вопрос о поправках к нулевому по $\omega\tau$ приближению можно решить в достаточно общем случае. Предположим, что гамильтониан невозмущенной системы включает в себя потенциальный член, не зависящий от импульсов,

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}).$$

Тогда оператор эволюции этой системы, при наложении внешнего возмущения $\hat{V}(t) = \mathbf{f}(t) \mathbf{r}$ (будем считать момент «встряски» началом отсчета времени, $t_0 = 0$) таков:

$$\hat{S}(+\infty, -\infty) = \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) [\hat{I} + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + O((\omega\tau)^3)], \quad (26)$$

$$\hat{\Delta}_1 = \frac{i}{\hbar m} \int_{-\infty}^{\infty} dt t \mathbf{f}(t) [\hbar \mathbf{q}(t) + \hat{\mathbf{p}}], \quad (27)$$

$$\hat{\Delta}_2 = \frac{(\hat{\Delta}_1)^2}{2} - \frac{1}{2m\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt t^2 \mathbf{f}(t) [U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}]; \quad (28)$$

здесь введено обозначение

$$\mathbf{q}(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \mathbf{f}(t'), \quad \mathbf{q} \equiv \mathbf{q}(+\infty). \quad (29)$$

В тех случаях, когда $\mathbf{f}(t) = \mathbf{f}(-t)$, величина $\hat{\Delta}_1$ становится чисто мнимым s -числом, не зависящим от координат, и в вероятностях переходов под влиянием возмущения $\mathbf{f}(t) \mathbf{r}$ отсутствуют поправки первого порядка по $\omega\tau$.

Иногда может возникнуть такое положение, что, хотя само возмущение $\hat{V}(t)$ и не малое, малым оказывается интеграл от него по времени. Зная лишь формулы нулевого встряхочного приближения, вероятности квантовых переходов в этом случае вычислить нельзя. Нужно воспользоваться выражениями для следующих поправок по $\omega\tau$ в операторе эволюции (17). Пусть, например, интеграл по времени от $\hat{V}(t)$ меньше или порядка $(\omega\tau)^2$. Тогда предельное при $\omega\tau \rightarrow 0$ выражение для амплитуды перехода ($|i\rangle \neq |f\rangle$) выглядит так:

$$\mathfrak{M}_{fi} \sim \frac{1}{\hbar^2} \langle f | \int_{-\infty}^{\infty} dt (t - t_0) [\hat{V}(t), \hat{\mathcal{H}}_0] | i \rangle. \quad (30)$$

б) Р а с с е я н и е в о б щ е м с л у ч а е ($\hat{\xi} \neq 0$)

Если операторы $\hat{V}(t)$, взятые в разные моменты времени, не коммутируют между собой, уравнение (6) даже при $\omega\tau \rightarrow 0$ не интегрируется так же просто, как в предыдущем пункте. А поскольку нас интересует область значений $V\tau/\hbar \gtrsim 1$, решения (6) или (7) бессмысленно искать в виде итераций. Можно, однако, поступить следующим образом.

Групповое свойство операторов эволюции

$$\hat{S}(t, t') = \hat{S}(t, t'') \hat{S}(t'', t') \quad (31)$$

позволяет представить $\hat{S}(t, t')$ в виде произведения

$$\hat{S}(t, t') = \hat{S}(t, t_n) \hat{S}(t_n, t_{n-1}) \dots \hat{S}(t_2, t_1) \hat{S}(t_1, t'). \quad (32)$$

Устремляя t_k к t_{k+1} (точнее говоря, требуется, чтобы $\delta t_k = t_{k+1} - t_k \ll \tau$), уравнение (6) легко проинтегрировать для каждого из сомножителей в (32):

$$\hat{S}(t_{k+1}, t_k) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{W}(t_k) \delta t_k \right]. \quad (33)$$

Соберем теперь попарно все члены в (32), применяя каждый раз формулу BCH (Baker — Campbell — Hausdorff) ¹³

$$\exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) = \exp \left\{ \hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \right. \\ \left. + \frac{1}{12} [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] + \dots \right\}. \quad (34)$$

В результате, оператор конечной эволюции (32) приводится к следующей экспоненциальной формуле (стандартный метод ^{6, 13-15} получения (35) — (38) состоит в том, чтобы сразу искать решение уравнения (6) в виде разложения (35)):

$$\hat{S}(t, t') = \exp(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 + \hat{A}_3 + \dots), \quad (35)$$

$$\hat{A}_1 = -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt \hat{W}(t), \quad (36)$$

$$\hat{A}_2 = \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 [\hat{W}(t_1), \hat{W}(t_2)], \quad (37)$$

$$\hat{A}_3 = \frac{1}{6} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \int_{t'}^{t_2} dt_3 \{ [\hat{W}(t_1), [\hat{W}(t_2), \hat{W}(t_3)]] + \\ + [[\hat{W}(t_1), \hat{W}(t_2)], \hat{W}(t_3)], \dots \} \quad (38)$$

Формулы (35) — (38) называются разложением Магнуса и представляют собой, как видно, непрерывный аналог формулы BCH (34). Отметим, для полноты, что в самом общем случае решение уравнения (6) удобно искать также с помощью подстановки ¹⁶

$$\hat{S}(t, t') = \exp(\hat{B}_1) \exp(\hat{B}_2) \exp(\hat{B}_3) \dots \quad (39)$$

Рекуррентные соотношения для \hat{A}_n и \hat{B}_n , представляющих собой n -кратные интегралы от $(n-1)$ -кратных коммутаторов операторов $\hat{W}(t)$, взятых в разные моменты времени, и другие математические подробности можно найти в работах ^{6, 13-18}.

В нулевом порядке по ωt в выражениях (35) — (39) надо произвести замену $\hat{W} \rightarrow \hat{W}_0$ (см. формулу (14)). Таким образом, в этом приближении \hat{A}_n и \hat{B}_n содержат $(n-1)$ -кратные коммутаторы от операторов $\hat{V}(t)$, взятых в разные моменты времени. В том случае, когда $\xi \equiv 0$, в разложениях (35) и (39) отличны от нуля лишь \hat{A}_1 и \hat{B}_1 , что соответствует результату предыдущего пункта. Если окажется, что коммутатор $\xi \ll 1$, в рамках разложений (35) — (39) легко будет написать теорию возмущений по степеням ξ .

Представление решения уравнения (6) в виде разложения (35) или (39) особенно удобно в таких ситуациях, когда $(n-1)$ -кратные коммутаторы, входящие в \hat{A}_n и \hat{B}_n , с ростом номера n в конце концов становятся s -числами. Если это происходит, например, при $n = n^*$, то все $\hat{A}_{n>n^*} \equiv \hat{B}_{n>n^*} \equiv 0$ и, следовательно, амплитуда рассеяния записывается

в конечном виде. Интересный и полезный пример именно такого положения — гармонический осциллятор, на который действует произвольная внешняя сила (в этом случае $n^* = 2$; см. гл. 5).

Подчеркнем в заключение, что, ввиду эрмитовости операторов \hat{A}_n любой способ обрывания бесконечного ряда в экспоненте (35) не нарушает унитарности оператора эволюции $\hat{S}(t, t')$.

в) «Встряхивание» с изменением гамильтониана системы

Пусть квантовая система находилась при $t \rightarrow -\infty$ в одном из стационарных состояний (мы рассматриваем сейчас чистый ансамбль), являющихся собственными функциями гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_i$:

$$\hat{\mathcal{H}}_i |i\rangle = E_i |i\rangle.$$

Вблизи момента времени t_0 система подвергается внезапному внешнему воздействию $\hat{V}(t)$, и, в результате, при $t \rightarrow +\infty$ оказывается в некотором стационарном состоянии, вообще говоря, другого гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_f$:

$$\hat{\mathcal{H}}_f |f\rangle = E_f |f\rangle$$

(см. рис. 3). «Внезапность» возмущения обусловлена тем фактом, что характерный интервал времени, в течение которого оно воздействует, много меньше характерных обратных частот $\omega^{-1} \sim \hbar/E_i \sim \hbar/E_f$.

Переопределим оператор возмущения таким образом, чтобы он исчезал при $t \rightarrow \pm\infty$:

$$\hat{\mathcal{G}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}(t) = \begin{cases} \hat{\mathcal{H}}_i + \hat{V}(t) & \text{при } t \leq t_0, \\ \hat{\mathcal{H}}_f + \hat{V}(t) & \text{при } t \geq t_0. \end{cases} \quad (40)$$

Амплитуда вероятности перехода между состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$ находится с помощью очевидного преобразования

$$\begin{aligned} \langle \Phi(t_+) | \hat{U}(t_+, t_0) \hat{U}(t_0, t_-) | \Phi(t_-) \rangle = \\ = \langle \Psi_f(t_+) | \hat{S}_f(t_+, t_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_f t_0\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_i t_0\right) \hat{S}_i(t_0, t_-) | \Psi_i(t_-) \rangle, \end{aligned} \quad (41)$$

$$t_- \leq t_0 \leq t_+. \mathfrak{M}_{fi} = \langle f | \hat{G} | i \rangle, \quad (42)$$

Точное выражение для нее следующее:

$$\hat{G} = \hat{S}_f(+\infty, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_f t_0\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_i t_0\right) \hat{S}_i(t_0, -\infty). \quad (43)$$

Индексы i и f волновых функций и операторов в (41), (43) означают, что эти величины записаны в представлении взаимодействия — один раз с невозмущенным гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}_i$, а другой — с $\hat{\mathcal{H}}_f$.

В формулировке процесса столкновения с использованием оператора квантовой плотности (для смешанного ансамбля) аналогичное выражение для вероятности нахождения системы в одном из собственных состояний $|f\rangle$ конечного гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_f$ имеет вид

$$w_f(i) = \langle f | \hat{G} \hat{\rho}_i \hat{G}^{-1} | f \rangle. \quad (44)$$

Подчеркнем, что результаты (42) — (44) — точные, они справедливы, при любых значениях ωt . Если же $\omega t \ll 1$, то для оценки операторов

эволюции, входящих в (42) — (44), непосредственно применяются все формулы из теории «встряски» типа рассеяния.

Как уже отмечалось, в отличие от «встряски» типа рассеяния, амплитуда перехода даже в нулевом порядке по ωt и $V\tau/\hbar$

$$\mathfrak{M}_{fi}^{00} = \langle f | i \rangle \quad (45)$$

и соответствующая вероятность

$$w_f^{00}(i) = \langle f | \hat{\rho}_t | f \rangle \quad (46)$$

здесь, вообще говоря, не малы.

г) Пример: переворачивание спина в магнитном поле

В этом пункте, на примере расчета вероятности переворачивания спина частицы, помещенной в переменное магнитное поле, мы проиллюстрируем некоторые особенности «встрясконого» приближения, и, в частности, покажем неприменимость простого результата (21) в том случае, когда операторы возмущения, взятые в разные моменты времени, не коммутируют между собой. Это удастся сделать потому, что указанная задача в нерелятивистском пределе допускает точное решение.

Предположим, что частица со спином $\hbar/2$ и магнитным моментом μ находится в пространстве, где имеется однородное магнитное поле \mathbf{H}_0 , постоянное и направленное вдоль оси z . В момент времени $t = 0$ включается однородное магнитное поле $\mathbf{H}_1(t)$, лежащее в плоскости x, y и поворачивающееся в ней с угловой скоростью Ω . При $t = \tau$ поле выключается. В интервале времени $0 < t < \tau$ частица находится в суммарном поле

$$\mathbf{H} = \{H_1 \cos \Omega t, H_1 \sin \Omega t, H_0\}. \quad (47)$$

Пусть, для определенности, при $t < 0$ спин частицы ориентирован в положительном направлении оси z , т. е. волновая функция есть $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Волновая функция, описывающая состояние частицы в любой момент времени из интервала $(0, \tau)$, имеет следующий вид:

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}, \quad (48)$$

$$a(t) = \frac{(\mu H_0 - \hbar \omega_2) \exp(i\omega_1 t) + (\hbar \omega_1 - \mu H_0) \exp(i\omega_2 t)}{\hbar(\omega_1 - \omega_2)}, \quad (49)$$

$$b(t) = \frac{(\hbar \omega_1 - \mu H_0)(\mu H_0 - \hbar \omega_2) \exp(i\Omega t) [\exp(i\omega_1 t) - \exp(i\omega_2 t)]}{\mu H_1 \hbar(\omega_1 - \omega_2)}; \quad (50)$$

здесь обозначено

$$\hbar \omega_{1,2} = -\frac{\hbar \Omega}{2} \pm \sqrt{\mu^2 H_1^2 + \left(\mu H_0 + \frac{\hbar \Omega}{2}\right)^2}. \quad (51)$$

Вероятность переворачивания спина к моменту времени $t = \tau$

$$|b(\tau)|^2 = \left[2 \frac{(\hbar \omega_1 - \mu H_0)(\mu H_0 - \hbar \omega_2)}{\mu H_1 \hbar(\omega_1 - \omega_2)} \sin\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2} \tau\right) \right]^2. \quad (52)$$

Пусть теперь интервал времени τ так мал, что выполняется условие «встряски»

$$\frac{\mu H_0 \tau}{\hbar} \ll 1 \quad (53)$$

и, более того, неравенство (53) настолько сильное, что в нормальных условиях достаточно было бы ограничиться нулевым приближением по $\mu H_0 \tau / \hbar$. Поскольку, однако, оператор взаимодействия

$$\hat{V}(t) = \mu H_1 \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\Omega t) \\ \exp(i\Omega t) & 0 \end{pmatrix} \quad (54)$$

не коммутирует сам с собой в разные моменты времени

$$\hat{\xi} \equiv [\hat{V}(t), \hat{V}(t')] = 2i\mu^2 H_1^2 \hat{\sigma}_z \sin[\Omega(t-t')] \quad (55)$$

($\hat{\sigma}_z$ — матрица Паули), теория, изложенная в пункте а), неприменима, и надо, в общем, учесть все члены в разложении Магнуса (35) или Фера (39) для оценки оператора временной эволюции.

В самом деле, расчет амплитуды вероятности переворачивания спина по формуле (21) дает

$$\mathcal{M}_{\downarrow\uparrow}^0 = \frac{1 - \exp(i\Omega\tau)}{2 \sin(\Omega\tau/2)} \sin\left(\frac{2\mu H_1}{\hbar\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2}\right). \quad (56)$$

Величина коммутатора (55) зависит от величины параметра $\Omega\tau$. С физической точки зрения этот параметр определяет угол, на который за время «встряски» успевают повернуться переменное поле $\mathbf{H}_1(t)$. При произвольных $\Omega\tau$ вероятность $|\mathcal{M}_{\downarrow\uparrow}^0|^2$ не имеет ничего общего с точным результатом (52) даже в пределе $\omega\tau \rightarrow 0$. Если же поле $\mathbf{H}_1(t)$ не успевает существенно изменить свое направление, т. е. $\Omega\tau \ll 1$, то, как нетрудно проверить, при условии (53) $|\mathcal{M}_{\downarrow\uparrow}^0|^2$ совпадает со своим точным эквивалентом и в нулевом, и в первом порядке по $\Omega\tau$.

3. «ВСТРЯХИВАНИЕ» ПРИ ПОЧТИ РЕЗОНАНСНОМ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА КВАНТОВУЮ СИСТЕМУ

Если возбуждение атомов или молекул происходит не в результате быстрого столкновения, а под влиянием внешнего переменного поля, условию «встряски» $\omega\tau \ll 1$ удовлетворить не так-то просто, ибо характерные времена взаимодействия τ , необходимые для этого, должны быть слишком короткими. Наоборот, в большинстве случаев при возбуждении квантовой системы внешним полем выполняется адиабатическое условие $\omega\tau \gg 1$ и вероятности переходов оказываются малыми. Исключением является (хотя здесь тоже $\omega\tau \gg 1$) самый эффективный в настоящее время способ раскачки систем с помощью резонансного лазерного поля. Со «встрясочной» точки зрения объясняется это тем, что задача о почти резонансном возбуждении квантовой системы в поле электромагнитного импульса конечной длительности сводится к задаче о «встряске», хотя частота внешнего воздействия и сравнима с внутренними частотами невозмущенной системы. Мы покажем сейчас, что применимость «встрясочного» подхода определяется малостью произведения расстройки в частотах Δ при почти резонансном возбуждении на длительность импульса τ внешнего воздействия. В этом смысле нулевое «встрясочное» приближение ($\Delta\tau \rightarrow 0$) эквивалентно резонансному приближению.

В эксперименте обычно имеют дело с возбуждением довольно сложных молекулярных систем, так что параметр $\Delta \cdot \tau$ может принимать какие угодно значения. Но как только $\Delta \cdot \tau$ становится порядка единицы и больше, вероятности разрешенных переходов на соответствующие уровни быстро падают, и, таким образом, весь спектр разбивается на отдельные группы уровней, для каждой из которых задача о резонансном возбуждении может решаться отдельно.

Рассмотрим поэтому произвольную n -уровневую систему, в которой расстояния между соседними уровнями почти одинаковы и приблизительно равны энергии кванта внешнего поля (\mathcal{H}_0 — гамильтониан системы, а E_k и $|k\rangle$ — его собственные значения и векторы):

$$\hbar\omega \sim E_{k+1} - E_k, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Будем считать, что внешнее возмущение $\hat{V}(t) \cos \omega t$ вызывает переходы только между соседними уровнями, причем оператор \hat{V} от времени не зависит, а огибающая импульса $\varphi(t)$ сосредоточена в основном в интервале времени τ вблизи момента $t = 0$. Максимум функции $\varphi(t)$ равен единице и, разумеется, $\omega\tau \gg 1$.

Решение уравнения Шрёдингера с помощью подстановки

$$\Psi(t) = \sum_{k=1}^n C_k(t) \exp(-ik\omega t) |k\rangle \quad (57)$$

после обычного исключения высокочастотных членов (мы считаем, что $|E_k - \hbar k\omega| \ll \hbar\omega$) приводит к системе уравнений

$$i\hbar \frac{\partial C_k}{\partial t} = (E_k - \hbar k\omega) C_k + \varphi(t) (V_{k, k-1} C_{k-1} + V_{k, k+1} C_{k+1}). \quad (58)$$

Эти уравнения описывают эволюцию во времени не исходной, а некоторой другой квантовой системы, с квазигамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}}' = \hat{\mathcal{H}}'_0 + \hat{V}\varphi(t). \quad (59)$$

Энергетический спектр \mathcal{H}'_0 представляет собой набор квазиуровней $E_k - \hbar k\omega$. Если для исходной системы, с гамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}\varphi(t) \cos \omega t \quad (60)$$

выполняется адиабатическое условие $\omega t \gg 1$, то для квантовой системы с квазигамильтонианом (59) может иметь место условие «встряски», если только

$$|E_k - \hbar k\omega| \frac{\tau}{\hbar} \ll 1. \quad (61)$$

Выполнение неравенств (61) означает, что вследствие конечности интервала времени τ все уровни возбуждаются, фактически, резонансным образом. На языке «встряски» резонансное приближение эквивалентно нулевому приближению по Δt . Это обстоятельство позволяет применить к решению задачи о квантовых переходах методы, изложенные в гл. 2.

Переходу к представлению взаимодействия, который использовался в гл. 2, соответствует в нашем случае переход от амплитуд $C_k(t)$ (см. (57)) к амплитудам $a_k(t)$, определяемым из разложения

$$\Psi(t) = \sum_{k=1}^n a_k(t) \exp\left(-\frac{iE_k t}{\hbar}\right) |k\rangle. \quad (62)$$

Вместо (58) в представлении взаимодействия имеем

$$i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = \varphi(t) \hat{W}(t) \hat{A}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}. \quad (63)$$

В $\hat{W}(t)$ отличны от нуля только элементы, стоящие вблизи главной диагонали.

$$W_{k, k+1} = V_{k, k+1} \exp(-i\Delta_k t), \quad w_{k, k-1} = V_{k, k-1} \exp(i\Delta_{k-1} t), \\ \hbar\Delta_k \equiv E_{k+1} - E_k - \hbar\omega. \quad (64)$$

Уравнение (63) имеет точно такой же вид, как и уравнение для оператора временной эволюции (6). И решается оно точно так же. В нулевом приближении по Δt получаем

$$\hat{A}(+\infty) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \varphi(t)\right] \hat{A}(-\infty). \quad (65)$$

В операторе \hat{V} , не зависящем от времени, отличны от нуля только элементы $V_{k, k+1}$ и $V_{k, k-1}$.

Результат (65) справедлив для любых значений $V\tau/\hbar$, т. е. при любой интенсивности электромагнитного импульса, стимулирующего переходы. Решение уравнения (63) в высших приближениях по Δt мы выписывать не будем. Приведем примеры расчетов вероятностей вынужденных переходов по формуле (65). В случае двухуровневой системы, которая при $t \rightarrow -\infty$ находилась в одном из своих стационарных состояний, вероятность перехода в другое состояние при $t \rightarrow +\infty$ определяется хорошо известным соотношением (ср., например, с¹²⁾)

$$w_{21} = \sin^2 \left[\frac{|V_{21}|}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \varphi(t) \right]. \quad (66)$$

Аналогично, для трехуровневой системы, находившейся первоначально, скажем, в самом нижнем состоянии $|1\rangle$, вероятности переходов

$$w_{11} = \left(\frac{|V_{12}|^2 \cos \Phi + |V_{23}|^2}{|V_{12}|^2 + |V_{23}|^2} \right)^2, \quad w_{31} = \left(\frac{|V_{12} V_{23}| (1 - \cos \Phi)}{|V_{12}|^2 + |V_{23}|^2} \right)^2, \quad (67)$$

$$w_{21} = \frac{|V_{12}|^2 \sin^2 \Phi}{|V_{12}|^2 + |V_{23}|^2}, \quad \Phi = \frac{\sqrt{|V_{12}|^2 + |V_{23}|^2}}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \varphi(t).$$

Резонансное приближение, с помощью которого от исходного гамильтониана (60) можно перейти к квазигамильтониану (59), а затем рассмотреть предел $\Delta t \rightarrow 0$, широко используется в расчетах вероятностей почти резонансных переходов. Для оценки пределов применимости такого подхода надо, например, сопоставить точное выражение для амплитуды перехода в гармоническом осцилляторе (см. ниже (79) — (80)) с соответствующей амплитудой в резонансном случае, когда в формуле для $f(\omega)$ стоит вместо $\varphi(t) \exp(-i\omega t)$ интеграл по времени от $\varphi(t) \exp(-i\Delta t)$ или от $\varphi(t)$. Сразу видно, что вклад отбрасываемых высокочастотных членов в фурье-компоненте $f(\omega)$ экспоненциально мал.

4. «ВСТРЯСОЧНЫЙ» ПАРАМЕТР N

Перебор различных моделей всевозможных быстрых столкновений, изучаемых в физике, показывает, что большинство из них формулируется двойным образом: либо соответствующие операторы возмущения $\hat{V}(t)$, взятые в различные моменты времени, выбираются коммутирующими между собой, либо, и так бывает чаще всего, результат столкновения можно интерпретировать как быструю передачу импульса квантовой системе.

Во втором случае, в нулевом порядке по ωt , как нетрудно заметить, на коммутационные соотношения для операторов $\hat{V}(t)$ не накладываются никакие ограничения. Проще всего понять это, если интерпретировать передачу импульса как «встряску» типа «включения», т. е. рассматривать сдвиг в импульсном пространстве (23) как следствие перехода к волновым функциям другого гамильтониана^{2, 12}. Поскольку при выводе формул (45), (46) не делается никаких предположений о коммутациях, результаты (24), (25), следующие из них, также справедливы для любых «встрясочных» процессов с быстрой передачей импульса.

Это обстоятельство значительно расширяет класс взаимодействий, вероятности квантовых переходов под влиянием которых определяются с помощью формул (24) и (25). Значительная часть нашей работы будет посвящена анализу процессов с быстрой передачей импульса и выяснению их общих закономерностей, связанных, фактически, с общностью результатов (24), (25).

Напомним сначала некоторые выводы из работы¹. Там показано, как различные элементарные процессы, протекающие с передачей большого импульса др электрону и происходящие во внешнем лазерном поле, стимулируют эффекты поглощения и испускания квантов этого поля (каналы с определенными подборками таких квантов впредь мы будем называть сателлитами). Первая стадия указанного процесса (ею может быть, например, рассеяние электрона на атоме, его движение в неоднородной среде, излучение или поглощение электроном светового кванта, комптон-эффект, β -распад, фотоэффект и т. п.) протекает в ряде случаев за времена τ , много меньшие периода низкочастотного движения электрона $2\pi/\omega$, вызванного внешним полем. При этом вторая стадия (вынужденное излучение — поглощение) не зависит от физической природы первой и является универсальной для любых процессов¹. Задача о вынужденных эффектах такого типа может быть раз и навсегда решена как задача о «встряске» электрона в присутствии внешнего поля.

В нерелятивистских внешних полях, где добавочная переменная скорость электрона \tilde{v} мала по сравнению со скоростью света, вероятности вынужденных каналов определяются величиной параметра¹

$$N \sim \frac{|\tilde{v} \delta p|}{\hbar \omega}, \quad (68)$$

характеризующего среднее квадратичное число испущенных или поглощенных квантов.

Интенсивность вынужденных переходов, стимулированных «встряской», должна, естественно, определяться не только интервалом времени, в течение которого внешнее возмущение воздействует на систему, но и интенсивностью этого возмущения, т. е. его абсолютной величиной. Как видно из выражения (68), N возрастает с увеличением интенсивности лазерного луча, так как при этом увеличивается значение \tilde{v} .

В предельных случаях $N \gg 1$ и $N \ll 1$ задача о «встряске» решается соответственно классическим и квантовомеханическим способом. В комптон-эффекте, где $\delta p = \hbar (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$, а также при «встряске» за счет излучения при поглощении жесткого фотона, когда $\delta p = \hbar \mathbf{k}$, параметр N не содержит постоянной Планка. Поэтому эффект появления спутников в спектре излучения удается объяснить с чисто классической точки зрения при любом N .

Введенный параметр N по порядку величины есть отношение амплитуды колебаний электрона во внешнем поле δR (в лазерном поле $\delta R = e E_0 / m \omega^2$) к де-Бройлевской длине волны электрона, рассчитанной по переданному импульсу, $\lambda = \hbar / \delta p$. В том случае, когда можно говорить о направлениях величин δp и δR , «встрясочный» параметр определяется их скалярным произведением:

$$N \sim \frac{1}{\hbar} |\delta p \cdot \delta R|. \quad (69)$$

Речь до сих пор шла о низкочастотном движении электрона, вызванном внешним лазерным полем. Мы указывали уже, что физическая причина низкочастотного движения электрона, который испытывает внезапный толчок, несущественна. Дело не в наличии лазерного поля. Подобные движения имеют место и в его отсутствии, например, при колебаниях атомных ядер в молекулах или кристаллах. При этом происходит естественное адиабатическое следование электронных оболочек за ядрами, во многом сходное с движением электрона в лазерной волне. Основное отличие колебательного движения электронной оболочки вместе с ядрами от соответствующего движения в лазерном поле состоит в его квантованности. Поэтому задача о вынужденных переходах в этом случае сводится к задаче о возбуждении квантового осциллятора, которому при столкновении передается импульс δp . Разброс по координатам δR обусловлен движением атомных ядер, участвующих в колебаниях и вращениях. В самой сложной ситуации, когда δR не представляет собой хорошо определенного вектора, значение N все равно оценивается с помощью соотношения.

$$N \sim \frac{1}{\hbar} \delta p \cdot \delta R \sim \frac{\delta p}{\delta p_0}, \quad (70)$$

где δp_0 — разброс по импульсам, отвечающий низкочастотному движению электрона.

Универсальность параметра N связана, по сути дела, с универсальностью выражения для амплитуды перехода (21) или (24). Однако далеко не всегда такое выражение входит в задачу явно, чаще всего оно завуалировано другими, более быстрыми процессами. Так обстоит дело, например, в задачах о влиянии колебаний ядер на сечения столкновений с электронной оболочкой молекулы (см. гл. 7). Разделяя с помощью адиабатического принципа электронные и ядерные движения и вычисляя сначала электронную часть амплитуды, можно свести расчет вероятности возбуждения колебаний или вращений к вычислению амплитуды типа (21) или (24).

В простейших случаях исследование перечисленных эффектов сводится к решению задачи о «встряске» линейного осциллятора или ротатора. Известно, что в случае гармонического осциллятора, на который действует произвольная внешняя сила, уравнение Шрёдингера допускает точное решение. Точно можно найти и амплитуды переходов (см., например, ¹⁹⁻²¹). Получение точных выражений для вероятностей переходов под действием внешней силы с помощью разложений Магнуса и Фера позволяет провести близкую аналогию между точным и «встрясочным» результатом и найти пределы применимости нулевого по ωt приближения (см. подробнее гл. 5). Модель гармонического осциллятора, на который действует произвольная внешняя сила, позволяет подробно проследить переход от задачи о возбуждении квантового к задаче о возбуждении классического осциллятора.

В применении к молекулам модель гармонического осциллятора удовлетворительна лишь для нескольких первых колебательных уровней, когда ангармонизм в движении ядер еще достаточно мал. Но при больших значениях «встрясочного» параметра N эффективно возбуждаются и высокие колебательные уровни ($v \sim N$), для описания которых необходимо учитывать отличие реального межатомного потенциала от осцилляторного. Поэтому в гл. 5 мы приведем выражения для вероятностей квантовых переходов при «встряске» некоторых нелинейных осцилляторов.

В столкновениях с участием молекул важной особенностью суммарного сечения (суммарного сечения всех вынужденных каналов) является коренная перестройка его интерференционной картины в той области параметров рассеяния, где, при учете колебаний атомных ядер, N достигает значений порядка единицы и больше (см. гл. 7). Эта интерференционная картина обязана своим происхождением многоцентровому характеру распределения электронной плотности в молекулах, но сохраняется она лишь в районе $N \ll 1$, в остальной же области параметров столкновения совершенно сглаживаются. Говоря об изменении в интерференции испускаемых или рассеиваемых частиц, «встрясочному» параметру N можно придать простой и наглядный смысл неопре-

деленности в фазах интерферирующих частиц вследствие неопределенности в положении ядер.

Рассеяние, как мы выяснили, фактически происходит на неподвижных атомах, положения которых «размазаны» в пространстве по определенному закону. Характер сечения определяется видом интерференционной картины, зависящей от пространственного распределения электронной плотности, которое в свою очередь зависит от положений ядер. Главную роль в такой картине играют фазовые соотношения для интерферирующих частиц. Будем говорить, для простоты, о рассеянии на электронной оболочке, связанной с одним «размазанным» ядром. Параметр, определяющий влияние колебаний, должен отражать появление неопределенностей в фазах каждой интерферирующей частицы

$$\delta\varphi_j = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p}_j \delta \mathbf{R}, \quad (71)$$

обусловленных неопределенностью в положении ядра $\delta \mathbf{R}$ (мы рассматриваем сейчас простейший случай, когда $\delta \mathbf{R}$ — вектор).

Проследим за изменением фазовых соотношений при рассеянии частицы из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$, как показано на рис. 4. Сдвиг ядра из положения A в A' приводит к появлению разности фаз между точками a_f и a'_f (отсчет фаз ведется от точек a_i и a'_i), равной

$$\delta\varphi = \delta\varphi_i - \delta\varphi_f = \frac{1}{\hbar} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) \delta \mathbf{R}. \quad (72)$$

Искомый параметр, характеризующий влияние «размазанности» ядра, не должен, очевидно, зависеть от знака $\delta\varphi$. В соответствии с (70),

$$N \equiv |\delta\varphi| = \frac{1}{\hbar} |\delta \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{R}|. \quad (73)$$

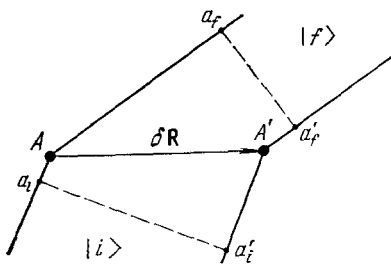


Рис. 4.

Хотя речь до сих пор шла о влиянии на сечение рассеяния колебаний атомного ядра, аналогичные рассуждения о фазовых соотношениях пригодны и для характеристики других явлений, когда пространственная «размазанность» $\delta \mathbf{R}$ обусловлена совершенно иной причиной, скажем, движением электрона на атомной оболочке, где $\delta \mathbf{R}$ уже не вектор, но все равно справедлива оценка типа (70):

$$N \equiv |\delta\varphi| \sim \frac{1}{\hbar} \delta \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{R}. \quad (74)$$

Хороший пример того, что простая интерференционная картина непосредственно не применима, но, тем не менее, «размазанность» в положении ядра $\delta \mathbf{R}$ связывается именно с полным переданным ядру импульсом $\delta \mathbf{p}$, представляет собой фотоэффект на молекулярном электроде. При поглощении жесткого кванта (\mathbf{k} , Ω) атомом, колеблющимся в молекуле или кристалле, выражение для «встрясочного» параметра непосредственно следует из (70), если подставить туда $\delta \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} - \mathbf{p}$, \mathbf{p} — импульс фотоэлектрона. Этот результат получается в плосковолновом приближении для волновой функции вылетающего электрона с помощью формулы (24).

Говоря о влиянии колебаний атомных ядер на сечение молекулярного фотоэффекта, необходимо подчеркнуть, что речь здесь может идти не о каких-то малых поправках, а о значительном изменении общего поведения сечения. Исследование особенностей релятивистского фотоэффекта на молекуле H_2 показывает²², что с увеличением энергии кванта $\hbar\Omega$, в том случае, когда колебания ядер не учитываются, число осцилляций в зависимости сечения фотоэффекта от угла вылета электрона (это и есть основная молекулярная специфика сечения, обусловленная многоцентровостью электронного облака) неограниченно возрастает. Корректный же учет колебаний смазывает частоту углового распределения фотоэлектронов с тем большей области углов, чем больше энергия падающего кванта. Таким образом, именно колебания формируют характерное угловое распределение фотоэлектронов при больших энергиях поглощаемых квантов.

Сечение фотоэффекта на молекуле осциллирует с изменением $\delta \mathbf{p}$ только при $N \ll 1$. Угловые размеры области осцилляции (имеются в виду углы между $\delta \mathbf{p}$ и $\delta \mathbf{R}$) уменьшаются с ростом энергии кванта $\hbar\Omega$, поскольку ее границы определяются условием $N \approx 1$. Ядра молекулы могут считаться неподвижными только в том случае,

если $N \ll 1$. Это неравенство определяет, например, пределы применимости известного подхода к расчетам фотоэффекта на больших молекулах, в котором волновая функция фотоэлектрона строится из комбинаций волновых функций электронов, вылетающих якобы из каждого атома в молекуле.

5. ВОЗБУЖДЕНИЕ ОСЦИЛЛЯТОРА

а) Гармонический осциллятор

Во всех процессах, рассмотренных в работе¹, не только «встрясочный» параметр N , но и выражения для относительного вклада отдельного сателлита являлись универсальными функциями. Универсальность эта связана с тем фактом, что речь в работе¹ все время шла, если разобранься, о «встряске» классического гармонического осциллятора, представляющего собой электрон, движущийся в световой волне. При быстрой ($\omega\tau \ll 1$) передаче импульса такому осциллятору структура этой быстрой стадии и вид гамильтониана взаимодействия, который ей соответствует, как уже указывалось, несущественны; результат зависит лишь от вектора суммарного переданного импульса.

В вопросах, связанных с колебаниями ядер, возникает аналогичная универсальность, обусловленная тем, что всегда фактически рассматривается задача о «встряске» квантового осциллятора. Сейчас мы подробно изложим эту задачу для гармонического осциллятора.

Рассмотрим одномерную модель, в которой за короткое время осциллятору передается импульс δp . Амплитуда перехода из колебательного состояния $|v\rangle$ в состояние $|v+n\rangle$, согласно (24), имеет вид

$$\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n}^0 = \langle v+n | \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \delta p \cdot x \right) | v \rangle. \quad (75)$$

Возникает вопрос о границах применимости «встрясочного» приближения (75) для вычисления амплитуды перехода $\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n}$. Для решения этого вопроса следует либо рассчитать следующие поправки по $\omega\tau$, воспользовавшись формулами (18) — (20), либо вообще отказаться от «встрясочной» концепции и попробовать найти амплитуду перехода с помощью разложения Магнуса (35) или Фера (39).

К счастью, в задаче о действии на гармонический осциллятор произвольной внешней силы $f(t)$ последний путь очень быстро приводит к точному решению. Дело в том, что оператор $x f(t)$, записанный в представлении взаимодействия, когда невозмущенный гамильтониан — гамильтониан гармонического осциллятора, имеет такую структуру, что коммутатор $[\hat{W}(t), \hat{W}(t')]$ не зависит ни от координат, ни от импульсов. Вследствие этого все члены разложений Магнуса и Фера, начиная с третьего, тождественно равны нулю, а вторые, A_2 и B_2 , приводят лишь к несущественному фазовому множителю в точной амплитуде. Такие множители впредь мы будем опускать, так что запишем

$$\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n} = \langle v+n | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{W}(t) \right] | v \rangle. \quad (76)$$

Выражение (76) намного упростится, если в нем выделить и опустить еще один неважный фазовый множитель. Покажем, как это сделать.

Перепишем формулу (76), раскладывая экспоненту в ряд Тейлора и введя для вспомогательных целей суммы по промежуточным

состояниям $|s_j\rangle$:

$$\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k M_k, \quad (77a)$$

$$\begin{aligned} M_k &= \langle v+n | \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{W}(t) \right\}^k | v \rangle = \\ &= \sum_{1 \leq j \leq k-1}^{s_j} \left\{ \langle v+n | \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{W}(t) | s_1 \rangle \dots \langle s_{k-1} | \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{W}(t) | v \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (77b)$$

Отличные от нуля сомножители в (77) имеют вид

$$\begin{aligned} \langle l \pm 1 | \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{W}(t) | l \rangle &= \langle l \pm 1 | x | l \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \exp(\pm i\omega t) = \\ &= \langle l \pm 1 | x | l \rangle |f(\omega)| \exp(\pm i\Phi), \end{aligned} \quad (78)$$

где ω — частота осциллятора. В любом слагаемом суммы (77) выделяется, как легко показать, один и тот же фазовый множитель $\exp(in\Phi)$, опустив который, получим окончательно

$$\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n} = \langle v+n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} |f(\omega)| x\right) | v \rangle \quad (79)$$

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \exp(-i\omega t). \quad (80)$$

Таким образом, точное выражение для амплитуды $\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n}$ отличается от амплитуды в нулевом порядке по ωt , $\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n}^0$, лишь заменой модуля фурье-компоненты $|f(\omega)|$ на переданный импульс δp , что делает вычисления по формулам (75) и (79) тождественными. Подставляя в (79) волновые функции невозмущенного гармонического осциллятора, находим (ср. 19-21)

$$\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n} = \sqrt{\frac{v!}{(v+n)!}} \left(\frac{\mathcal{N}_0^2}{2}\right)^{n/2} \exp\left(-\frac{\mathcal{N}_0^2}{4}\right) L_v^n\left(\frac{\mathcal{N}_0^2}{2}\right), \quad (81)$$

$$\mathcal{N}_0 = \frac{|f(\omega)|}{\sqrt{m_0 \hbar \omega}}, \quad (82)$$

где $L_v^n(z)$ — полиномы Лагерра, m_0 — масса осциллятора.

В нулевом по ωt приближении $\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n}^0$ отличается от $\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n}$ только заменой \mathcal{N}_0 на «встрясочный» параметр

$$N_0 = \frac{\delta p}{\sqrt{m_0 \hbar \omega}}. \quad (83)$$

Нижний индекс у N_0 (а вместе с ним и у \mathcal{N}_0) означает, что если записать выражение для «встрясочного» параметра в форме (70), то соответствующая амплитуда колебаний $\delta R_0 \equiv \sqrt{\langle \delta R^2 \rangle_0}$ относится к основному ($v=0$) состоянию осциллятора. Применительно к произвольному состоянию, мы должны были бы положить

$$N_v \equiv \frac{1}{\hbar} \sqrt{2} \delta p \sqrt{\langle \delta R^2 \rangle_v} = \delta p \sqrt{\frac{2v+1}{m_0 \hbar \omega}}. \quad (84)$$

$$\mathcal{N}_v \equiv |f(\omega)| \sqrt{\frac{2v+1}{m_0 \hbar \omega}}. \quad (85)$$

Все полученные выводы сохраняют свою силу и для вынужденных переходов в классическом осцилляторе. Классическому пределу отвечает устремление v к бесконечности в выражениях (81), (84), (85). Преобразование амплитуды (81) к пределу $v \gg 1$ осуществляется с помощью разложения²³

$$z^{n/2} e^{-z/2} L_v^n(z) = \frac{\Gamma(v+n+1)}{v!} \left(v + \frac{n+1}{2}\right)^{-n/2} \times \\ \times \sum_{l=0}^{\infty} a_l \left(\frac{z}{4v+2n+2}\right)^{l/2} J_{n+l}(\sqrt{z(4v+2n+2)}); \quad (86)$$

здесь $a_0 = 1$, $a_1 = 0$, $a_2 = (n+1)/2$, а остальные коэффициенты находятся из рекуррентного соотношения

$$(l+2) a_{l+2} = (l+n+1) a_l - (2v+n+1) a_{l-1}, \quad l = 1, 2, \dots$$

Отсюда видно, что при не слишком малых N/v и больших v амплитуда $\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n}$ записывается в виде комбинаций функций Бесселя с различными индексами, а в пределе $v \rightarrow \infty$

$$\mathfrak{M}_{v \rightarrow v+n} \rightarrow J_n(\mathcal{N}). \quad (87)$$

В формуле (87) появилось классическое значение параметра \mathcal{N} :

$$\mathcal{N} \equiv \sqrt{2v\mathcal{N}_0}, \quad (88)$$

которое, вместе с соответствующим классическим значением «встрясочного» параметра N (выражение для последнего в точности совпадает с полученным в работе¹), находится из (84) и (85) при устремлении $v \rightarrow \infty$.

Решение вопроса о границах применимости нулевого по ωt приближения сводится в рассмотренной задаче к сопоставлению параметров \mathcal{N} и N . При малых ωt поправки в \mathcal{N} к величине N существенно зависят от временной структуры $f(t)$. Как правило, они порядка $(\omega t)^2$ или меньше (см. пояснения к формулам (26) — (29)). Но при большом вкладе «хвостов» в распределение $f(t)$, как это имеет место, например, при лоренцевской форме импульса, поправки становятся порядка ωt , а иногда и больше.

б) Параметрическая «встряска» гармонического осциллятора при произвольной температуре

Предположим, что в осцилляторе за очень короткое время τ ($\omega t \ll 1$) меняются масса, $m_i \rightarrow m_f$, и частота, $\omega_i \rightarrow \omega_f$ (речь идет, например, о поглощении или испускании нейтрона колеблющимся легким ядром, входящим в состав молекулы, или о β -распаде такого ядра). При произвольной температуре вероятность нахождения осциллятора в определенном квантовом состоянии $|f\rangle$ после такой параметрической «встряски» определяется с помощью формулы (46).

Указанная задача до конца решается при «встряске» гармонического осциллятора. Оператор квантовой плотности одномерного гармонического осциллятора, записанный в x -представлении,

$$\hat{\rho}(x, x') = \\ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \operatorname{sh}(\hbar\omega/T)}} \exp \left[-(x^2 + x'^2) \frac{m\omega}{2\hbar} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{T} + xx' \frac{m\omega}{\hbar \operatorname{sh}(\hbar\omega/T)} \right]; \quad (89)$$

m и ω — масса и частота осциллятора, T — температура, измеряемая в энергетических единицах.

Используя это выражение, получаем вероятности нахождения осциллятора в любом из четных состояний

$$w_{2n} = \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} \left(\frac{b}{a}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{c}{a^2}\right)^n s^{-2n-1/2} \times \\ \times (s-1)^n (s-\lambda)^n F\left(-n, -n; \frac{1}{2}; \frac{\lambda}{(s-1)(s-\lambda)}\right), \quad (90)$$

а также в любом из нечетных

$$w_{2n+1} = \frac{(2n+1)!}{2^{2n}(n!)^2} \left(\frac{b}{a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{c}{a^2}\right)^n s^{-2n-3/2} \times \\ \times (s-1)^n (s-\lambda)^n F\left(-n, -n; \frac{3}{2}; \frac{\lambda}{(s-\lambda)(s-1)}\right). \quad (91)$$

Индексы у w соответствуют обычной нумерации квантовых уровней осциллятора, F — гипергеометрическая функция, $n = 0, 1, 2, \dots$,

$$a^2 = \frac{c}{2} + \frac{m_i \omega_i}{2\hbar} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega_i}{T}, \quad ab = \frac{m_i \omega_i}{2\hbar \operatorname{sh} (\hbar \omega_i / T)}, \\ c = \frac{m_f \omega_f}{\hbar}, \quad s = \frac{a^2 - b^2}{c}, \quad \lambda = \frac{b^2}{a^2 - c}.$$

В частности, вероятности заселения основного и первого возбужденного состояний после «встряски»

$$w_0 = \sqrt{\frac{bc}{a(a^2 - b^2)}}, \quad (92)$$

$$w_1 = w_0^3. \quad (93)$$

в) Негармонические осцилляторы

Имея в виду приложения задачи о «встряске» осциллятора к реальным молекулярным системам, мы кратко обсудим особенности вынужденных переходов при наличии ангармонизма в колебаниях ядер. Мы указывали выше, что учет ангармонизма обязателен при больших значениях «встряточного» параметра N , когда эффективно возбуждаются высокие колебательные уровни.

Главная особенность реального межатомного потенциала $U(R)$ (далее, мы, для определенности, будем говорить о двухатомной молекуле) заключается в его несимметричности относительно равновесного межъядерного расстояния R_0 . Для того чтобы не «потерять» эту асимметрию, необходимо вместо традиционного разложения $U(R)$ в ряд по степеням $(R - R_0)$ исследовать разложение $U(R)$ по степеням $1/R$ или $(R - R_0)/R$ (см. например, ²⁴⁻²⁷).

Использование уже простейшего потенциала

$$U(R) = U_0 - \frac{\alpha}{R} + \frac{\beta}{R^2}, \quad \alpha, \beta > 0, \quad (94)$$

позволяет относительно легко учесть эффекты ангармоничности колебаний в молекулах. Важно также, что уравнение Шрёдингера с центральным потенциалом типа (94) допускает точное решение для произвольных колебательно-вращательных состояний (переобозначение констант, входящих в (94), сводит эту задачу к задаче об атоме водорода). Следовательно, в рамках потенциала (94) возможно строгое исследование колебательно-вращательного взаимодействия в молекуле, чего нельзя сделать, например, при использовании гармонического потенциала.

Как и в пункте а), мы рассмотрим возбуждение в результате «встряски» одномерного осциллятора с потенциальной энергией типа (94)

$$U(x) = U_0 - \frac{\alpha}{x} + \frac{\beta}{x^2}, \quad \alpha, \beta > 0. \quad (95)$$

Квантовые состояния дискретного спектра этого осциллятора нумеруются целыми числами $v = 0, 1, 2, \dots$. Соответствующие энергии

$$E_v = U_0 - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0}, \quad q = \frac{\alpha m_0}{\hbar^2(a+v)}, \quad a = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2\beta m_0}{\hbar^2}}; \quad (96)$$

и волновые функции

$$\Psi_v(x) = \frac{1}{\Gamma(2a)} \sqrt{\frac{q\Gamma(v+2a)}{v!(v+a)}} (2qx)^a e^{-qx} F(-v, 2a; 2qx), \quad (97)$$

F — вырожденная гипергеометрическая функция.

«Размазанность» в импульсах в основном состоянии осциллятора (95) — (97) порядка $\hbar q$. Следовательно, в задаче о возбуждении нашего осциллятора при быстрой передаче ему импульса должен появиться «встрясочный» параметр типа (70) или (83):

$$N_0 = \frac{\delta p}{\hbar q}. \quad (98)$$

И действительно, вероятность возбуждения с переходом $0 \rightarrow v$, рассчитанная по формуле (24), есть

$$|\mathfrak{M}_{0 \rightarrow v}|^2 = \frac{a}{a+v} \frac{\Gamma(v+2a)}{v! \Gamma(2a)} [4a(a+v)]^{2a+1} \frac{a^2 N_0^2 (v^2 + a^2 N_0^2)^{v-1}}{[(2a+v)^2 + a^2 N_0^2]^{v+2a+1}}. \quad (99)$$

Приведем также простое выражение для вероятности осциллятору (95) — (97) не возбудиться при «встряске»:

$$|\mathfrak{M}_{0 \rightarrow 0}|^2 = \left(1 + \frac{N_0^2}{4}\right)^{-2a-1}. \quad (100)$$

Для сравнения отметим, что вероятность этого же канала в случае гармонического осциллятора спадает с ростом N экспоненциально (см. формулу (81)), а в случае одномерного потенциала Морзе

$$U(x) = U_0 \left[\exp\left(-\frac{2x}{x_0}\right) - 2 \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) \right] \quad (101)$$

она дается выражением

$$|\mathfrak{M}_{0 \rightarrow 0}|^2 = \prod_{n=0}^{\infty} \left[1 + \left(\frac{N_0}{n+\varepsilon-1} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (102)$$

$$N_0 = \frac{1}{\hbar} \delta p \cdot x_0, \quad \varepsilon = \frac{1}{\hbar} x_0 \sqrt{2m_0 U_0}. \quad (103)$$

Из приведенных примеров видно, что в самых различных ситуациях вероятности вынужденных переходов определяются величиной единственного «встрясочного» параметра (70), который тем самым представляет собой главную характеристику рассмотренного круга задач.

6. «ВЫТЯХИВАНИЕ» ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ АТОМНЫХ ОБОЛОЧЕК

а) Столкновения нейтронов с легкими атомами

По-видимому, первым непосредственным применением идеи о «встряске» к вычислению амплитуды квантовых переходов явилась задача об ионизации атомов при столкновении их с нейтронами²⁸. Считая, что за короткое время τ ядро атома получает импульс $\hbar q$, амплитуду пере-

хода в нулевом порядке по $\omega\tau$ (здесь $\hbar\omega$ — характерные электронные энергии) можно вычислить по формуле (24).

Практический интерес представляет вероятность ионизации, проинтегрированная по направлениям импульса вылетающего электрона

$$\frac{dw}{dp} = (2\pi\hbar)^{-3} \int d\left(\frac{\mathbf{p}}{p}\right) p^2 |\langle f | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | i \rangle|^2, \quad (104)$$

а также полная вероятность ионизации при данном q :

$$w(q) = \int dp \frac{dw}{dp}. \quad (105)$$

Если же вопрос ставится таким образом, что можно ввести и некоторую функцию распределения $g(q)$ (величина $g(q) dq$ определяет вероятность

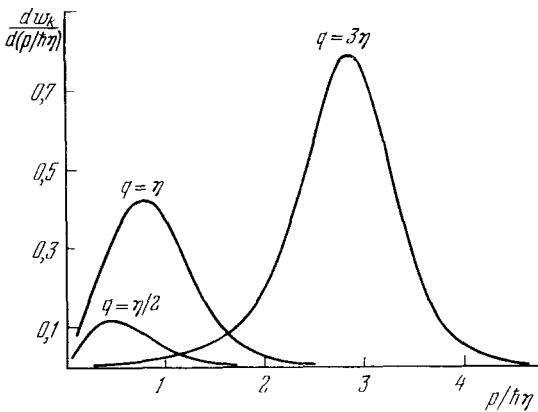


Рис. 5. Спектр электронов, «вытряхиваемых» из K -оболочки.

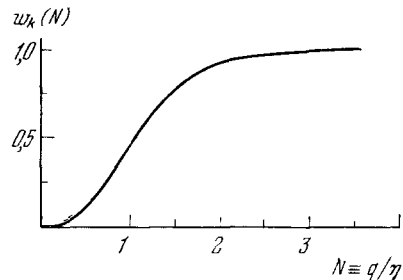


Рис. 6. Вероятность «вытряхивания» электронов из K -оболочки.

передать ядру импульс, лежащий в интервале от q до $q + dq$, то вероятность ионизации

$$w = \int dq g(q) w(q). \quad (106)$$

В случае водородоподобного атома, когда электроны «вытряхиваются» из K - или L -оболочки, вероятность dw/dp может быть найдена аналитически. «Встрясочный» параметр, характеризующий вероятности переходов в нашей задаче, имеет смысл определить следующим образом:

$$N \equiv \frac{nq}{\eta} = \frac{nq\hbar^2}{Ze^2m} \quad (107)$$

n — главное квантовое число оболочки, из которой выбивается электрон, Z — заряд ядра, m — масса электрона. Введем также безразмерное отношение $\gamma \equiv np/\hbar\eta$.

Вероятность «вытряхивания» электрона из K -оболочки²⁸

$$\frac{dw_K}{d\gamma} = \frac{2^8 \cdot N^2 \gamma}{3[1 - \exp(-2\pi/\gamma)]} \frac{3N^2 + \gamma^2 + 1}{(\alpha^2 + 4\gamma^2)^3} \exp\left(-\frac{2}{\gamma} \operatorname{Arctg} \frac{2\gamma}{\alpha}\right); \quad (108)$$

здесь $\alpha = N^2 - \gamma^2 + 1$, ветвь функции Arctg выбрана так, что $\operatorname{Arctg}(x) = \pi + \arctg(x)$, если $x < 0$, и $\operatorname{Arctg}(x) = \arctg(x)$, если $x \geq 0$.

Спектры электронов, «вытряхиваемых» из K -оболочки, при фиксированных значениях N представлены на рис. 5. Зависимость полной вероятности от величины «встрясочного» параметра N показана на рис. 6.

Вероятности «вытряхивания» электронов из любой из L -подоболочек находятся с помощью общего соотношения (ниже показано, что математически задача о вычислении dw/dp эквивалентна задаче о расчете сечения нерелятивистского комптон-эффекта ²⁹⁻³¹):

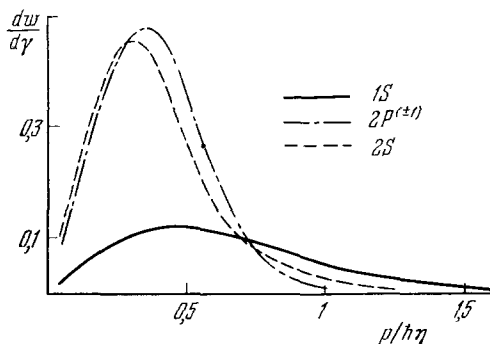


Рис. 7. Сравнение спектров электронов, «вытряхиваемых» из K - и L -оболочек ($q = \eta/2$).

$$\frac{dw_L}{d\gamma} = \frac{2^{11} N^2 \gamma}{15 \kappa^5} S \frac{\exp[-(4/\gamma) \operatorname{Arctg}(2\gamma/\alpha)]}{1 - \exp(-4\pi/\gamma)},$$

$$\kappa = (1 + \gamma^2 + N^2)^2 - 4N^2\gamma^2. \quad (109)$$

Выражения для функции S в (109) специфичны для каждой конкретной подоболочки. Так, для $2S$ -состояния

$$S_{2S} = 5\kappa^2 (3N^2 + \gamma^2 + 4) - 2^4 15\kappa N^2 (N^2 + 1) + 2^6 N^2 (15N^4 + 10N^2 + 2\gamma^4 + 5\gamma^2 - 5N^2\gamma^2 + 3). \quad (110)$$

При «вытряхивании» электрона, первоначально находившегося на $2P^{(\pm 1)}$ -уровне,

$$S_{2P^{(\pm 1)}} = 4\kappa (\gamma^2 + 4) (5N^2 + \gamma^2 + 1). \quad (111)$$

Наконец, для $2P^{(0)}$ -электрона (обозначим $\beta = \gamma^2 - N^2 + 1$)

$$S_{2P^{(0)}} = \beta^2 (7\gamma^4 + 40\gamma^2 + 48) + \frac{5}{2} \beta (\gamma^2 + 4) (4\beta (\gamma^2 + 4N^2) - \kappa) + \frac{15}{16} [4\beta (\gamma^2 - 4N^2) - \kappa]^2. \quad (112)$$

Результаты расчетов по формулам (109) — (112) приведены на рис. 7, 8. Отметим, что каналы с «вытряхиванием» K - или L -электронов могут

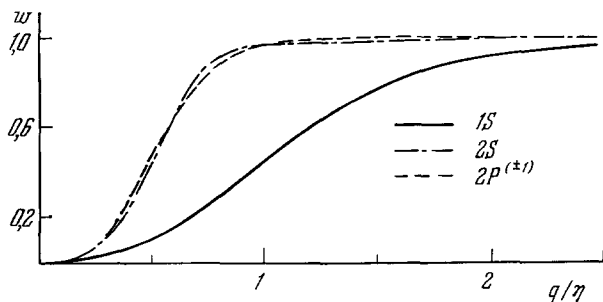


Рис. 8. Сравнение вероятностей «вытряхивания» электронов из K - и L -оболочек.

быть экспериментально разделены путем регистрации излучения возбужденных ионов, образующихся при удалении электронов с разных внутренних оболочек.

б) К о м п т о н - э ф ф е к т на слабосвязанном электроном

В рассеянии фотона связанным электроном «встрясочная» ситуация имеет место в тех случаях, когда энергия электрона в начальном и конечном состояниях мала по сравнению с энергией кванта $\hbar\Omega$. Время «встряски» оценивается при этом следующим образом. Поглощение налетающего

кванта приводит к нарушению закона сохранения энергии на величину $\Delta E \sim \hbar\Omega$. Следовательно, рассеянный квант должен испуститься за время $\tau \sim \hbar/\Delta E \sim 1/\Omega$.

«Встрясочный» характер процесса упругого рассеяния рентгеновских лучей легкими атомами подчеркивался в работе ³² в связи с различием факторов Дебая — Уоллера при резонансном и нерезонансном рассеянии излучения в кристаллах. В нерелятивистской области энергий налетающих квантов, всегда, когда можно пренебречь поправками второго порядка по $\omega\tau$ и $\hbar\Omega/mc^2$, сечение комптон-эффекта удастся представить в нерелятивистском «встрясочном» виде для любых каналов рассеяния, сопровождающихся как связанно-связанными, так и связанно-свободными переходами электрона ³⁰. К примеру, для канала ионизации с выбиванием электрона из произвольной nS -оболочки в первом порядке по $\omega\tau$ и $\hbar\Omega/mc^2$ имеем обычный результат (в формулах (113) — (116) используются релятивистские единицы, $\hbar = c = 1$)

$$\frac{d^3\sigma_S}{dt d\Omega_2 d\omega_2} = \frac{r_e^2 (1 + \cos^2 \theta)}{8\pi^2} \frac{\Omega_2}{\Omega_1} pm |\langle f | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} | i \rangle|^2 \quad (113)$$

$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}_{1,2}$ — волновые векторы налетающего и рассеянного фотонов, $\Omega_{1,2}$ — их частоты, θ — угол рассеяния, \mathbf{p} — импульс вылетающего электрона, $\mathbf{p}\mathbf{k} = p k t$, $r_e = e^2/mc^2$ — «классический радиус» электрона, $d\omega_2$ — элемент телесного угла, в котором лежит вектор \mathbf{k}_2 ; волновая функция конечного состояния электрона предполагается нормированной на единичный объем. Для комптон-эффекта на nP -электронах удобно записать ³⁰

$$\frac{d^3\sigma_P}{dt d\Omega_2 d\omega_2} = \frac{r_e^2 (1 + \cos^2 \theta)}{8\pi^2} pm \frac{\Omega_2}{\Omega_1} \sum_{j=1}^3 \rho_j^2 |M_j|^2, \quad (144)$$

$$\mathbf{M} = \langle f | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}}{r} | R_P \rangle. \quad (115)$$

Для подоболочек с различными моментами и их проекциями ($nP_{1/2}$, $nP_{3/2, 1/2}$, $nP_{3/2, 3/2}$) вектор \mathbf{p} имеет соответственно компоненты $(1, 1, 1)$, $(1/\sqrt{2})(-1, -1, 2)$ и $\sqrt{3/2}(1, -1, 0)$, R_P — радиальная часть волновой функции.

Ясно, что при вычислении сечений комптон-эффекта на электронах K - и L -оболочки по формулам (113) — (115) можно воспользоваться результатами (108) — (112). Так, в случае $2P_{3/2, 3/2}$ -электрона надо использовать (109) с выражением для S , взятым из (111). А для электронов из $2P_{1/2}$ и $2P_{3/2, 1/2}$ -подоболочек нужно использовать (109) с комбинациями $(2S_{2P}^{(\pm 1)} + S_{2P}^{(0)})/3$ и $(S_{2P}^{(\pm 1)} + 2S_{2P}^{(0)})/3$. Для иллюстрации на рис. 9 показаны угловые распределения комптоновских квантов при рассеянии на свободном электроне и на электронах K - и L -оболочки.

Можно, разумеется, классифицировать состояния электронов на $2P$ -оболочке и по обычной нерелятивистской схеме, как это делалось в предыдущем пункте. При такой классификации сечения комптон-эффекта непосредственно связаны с вероятностями «вытряхивания» электронов из K - или L -оболочки (108) — (112):

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_2 d\omega_2} = r_e^2 (1 + \cos^2 \theta) \frac{\Omega_2}{\Omega_1} \frac{m}{p} \frac{dw}{dp} \quad (116)$$

Угловые распределения комптоновских квантов, полученные интегрированием сечений (116), показаны на рис. 10. Отметим, что интерпретация процесса рассеяния как «встряски» имеет особую эвристическую ценность

в области параметров столкновения, где

$$\alpha Z m c^2 \gg \hbar \Omega \gg |E_{\text{св}}|$$

(α — постоянная тонкой структуры, Z — эффективный заряд ядра, $E_{\text{св}}$ — энергия связи электрона в атоме). В этом диапазоне энергий

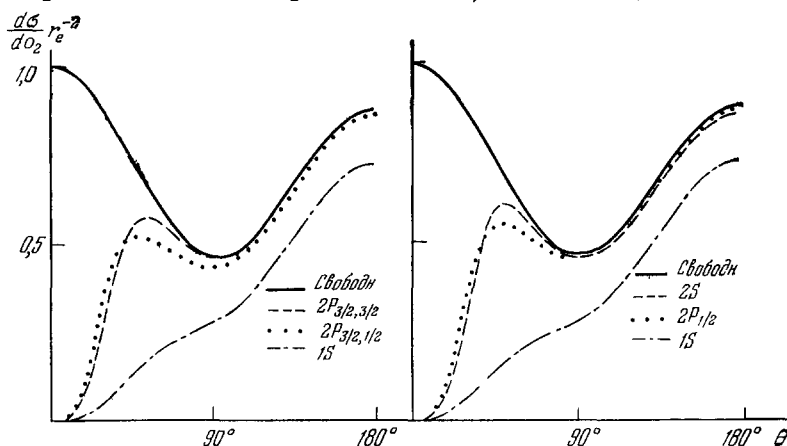


Рис. 9. Угловые распределения рассеянных фотонов в комптон-эффекте на свободном покоящемся электроном (сплошные кривые) и на электронах K- и L-оболочек атома углерода ($Z_{\text{Я}} = 6$) (энергия налетающего кванта 20 кэв).

на сечение комптон-эффекта оказывает заметное влияние взаимодействие электрона с ионным остатком в конечном состоянии, так как вылетающий электрон обладает, в среднем, относительно малым импульсом. Точный учет этого влияния, как правило, безнадежен; исключение оставляют нерелятивистские расчеты сечений ионизации с выбиванием электронов из внутренних оболочек. Мы покажем сейчас, как эти точные расчеты можно использовать для апробирования «встрясочного» подхода, с точки зрения того, что главной характеристикой углового распределения рассеянных квантов в комптон-эффекте на связанном электроном снова должен быть подходящим образом выбранный «встрясочный» параметр N . Общие закономерности, которые при этом выяснятся, имеют силу и в других, более сложных ситуациях, не поддающихся строгому рассмотрению.

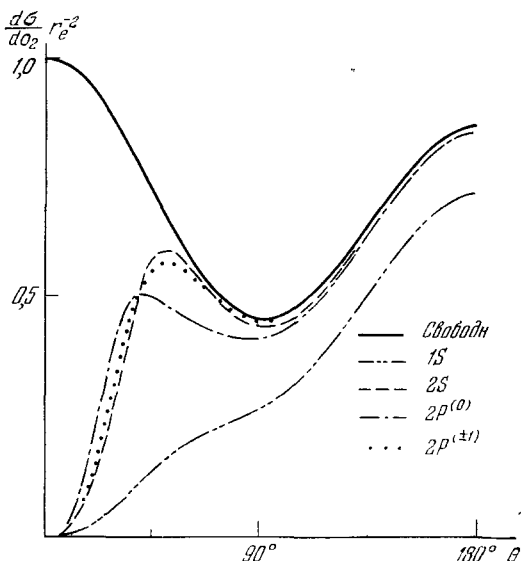


Рис. 10. Угловые распределения рассеянных фотонов в комптон-эффекте на свободном покоящемся электроном и на электронах K- и L-оболочек атома углерода ($Z_{\text{Я}} = 6$) (энергия налетающего кванта 20 кэв).

в комптон-эффекте на связанном электроном не сохраняется и перед нами тот самый случай, когда при вычислении амплитуды (24) величина δr ,

входящая в соответствующий «встрясочный» параметр, становится неопределенной. Тем не менее в комптон-эффекте удастся ^{30,41} ввести «встрясочный» параметр типа (70),

$$N \sim \delta k \cdot \delta R \sim \frac{\hbar \delta k}{\delta p_0}, \quad (117)$$

если учесть относительную узость комптоновской линии для слабосвязанного электрона (под $\hbar \delta k$ в формуле (117) понимается среднеквадратичное значение импульса, передаваемого электрону в процессе рассеяния).

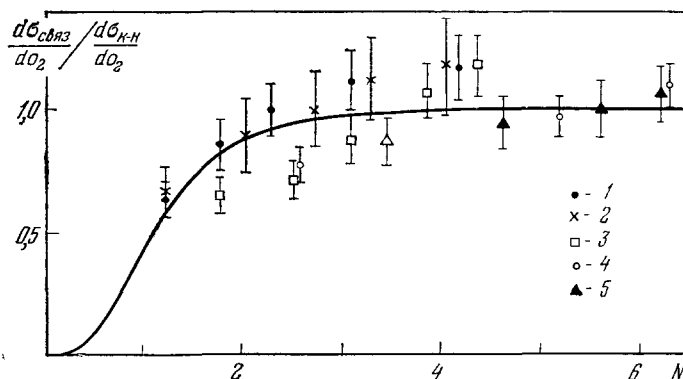


Рис. 11. Комптон-эффект на K -оболочке Sn ($Z_H = 50$).

Экспериментальные результаты: 1 — из работы ³⁴, 2 — из ³⁵, 3 — из ³⁶, 4 — из ³⁷, 5 — из ³⁸.

Проще всего отыскать δk в первом порядке по αZ , используя для этой цели формулу Комптона

$$\Omega_1 = b\Omega_2, \quad b = 1 + \frac{\hbar\Omega_1}{mc^2} (1 - \cos \theta). \quad (118)$$

Если, например, электрон в начальном состоянии занимал атомную оболочку с главным квантовым числом n , то результат вычислений для любых энергий налетающего кванта $\hbar\Omega_1$ нам будет удобно записать в следующем виде (ср. с ^{30,31} и с формулой (107)):

$$N = \frac{n\hbar\Omega_1 \sqrt{1+b^2-2b \cos \theta}}{\alpha Z mc^2 b}. \quad (119)$$

Величиной параметра N определяется отличие углового распределения рассеянных квантов в случае связанного электрона от распределения Клейна — Нишины

$$\frac{d\sigma_{К-Н}}{d\Omega_2} = \frac{r_e^2}{2b^2} \left(b + \frac{1}{b} - \sin^2 \theta \right). \quad (120)$$

Как показано в работах ^{30,31}, охарактеризовать величиной параметра (119) удобно именно отношение сечения комптон-эффекта на связанном электроны $d\sigma_{связ}/d\Omega_2$ к сечению Клейна — Нишины (120). Это находится в полном согласии со «встрясочной» интерпретацией процесса рассеяния. Вся совокупность картинок, подобных рис. 9 или 10, описывается несколькими кривыми для отношений $d\sigma_{связ}/d\sigma_{К-Н}$ в зависимости от «встрясочного» параметра N (см. ниже, рис. 11—15). Причина такой универсальности в том, что наибольший вклад в сечение дает область максимума комптоновской линии, ширина которой тем меньше, чем меньше от.

Здесь просматривается глубокая аналогия между поведением величин $d\sigma_{\text{связ}}/d\sigma_{K-H}$ и w (см. предыдущий пункт) в зависимости от соответствующих «встрясочных» параметров (119) и (107).

«Встрясочный» подход удобен для систематизации экспериментальных данных о рассеянии жесткого γ -излучения атомными электронами.

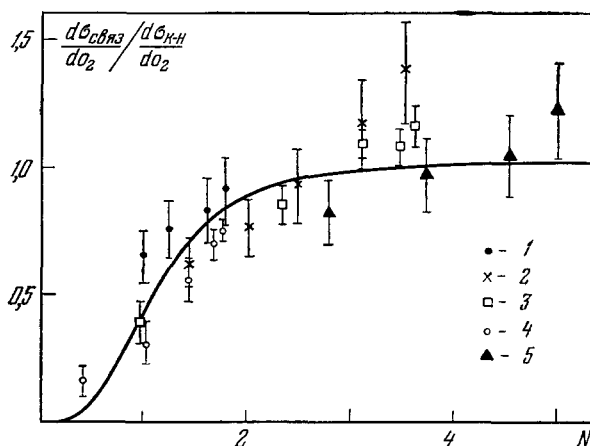


Рис. 12. Комптон-эффект на K -оболочке Sm ($Z_A = 62$).

Экспериментальные результаты: 1 — из работы ³⁹, 2 — из ³⁶, 3 — из ⁴⁰, 4 — из ⁴¹, 5 — из ³⁸.

зывает на самую главную закономерность — на характеристику сечения параметром N . Нужно, конечно, помнить, что для этого значения ω должны быть малы. На рис. 11 и 12 представлены экспериментальные значения отношений $d\sigma_{\text{связ}}/d\sigma_{K-H}$, в зависимости от N , полученные обработкой данных о рассеянии γ -квантов с энергиями от 279 кэв до 1,12 мэв на K -оболочке атомов Sn и Sm на углы θ от 20 до 160°. При вычислении N по формуле (119) здесь и ниже учитывается, с помощью правил Слэйттера, экранирование поля ядра другими электронами. Теоретическая кривая, проведенная на рис. 11, 12, получена в работе ³¹; она относится к нерелятивистской области энергий фотона $\hbar\Omega \ll mc^2$.

Теоретическую кривую, необходимую для анализа экспериментальных данных о рассеянии на заполненной L -оболочке, можно получить, исходя из результатов для отдельных подоболочек. В работе ³⁰ исследовались зависимости $d\sigma_{\text{связ}}/d\sigma_{K-H}$ от «встрясочного» параметра N при рассеянии на подобо-

Теоретические исследования углового распределения комптоновских квантов в релятивистской области их энергий ($\hbar\Omega \gg mc^2$) в настоящее время весьма редки и ненадежны (наиболее последовательное изложение этого вопроса содержится в работе ³³). Трудоемкость даже численных оценок ³³ не позволяет проанализировать все возникающие в эксперименте ситуации и отыскать какие-либо закономерности.

«Встрясочная» же интерпретация комптоновского рассеяния на слабо-связанных электронах ука-

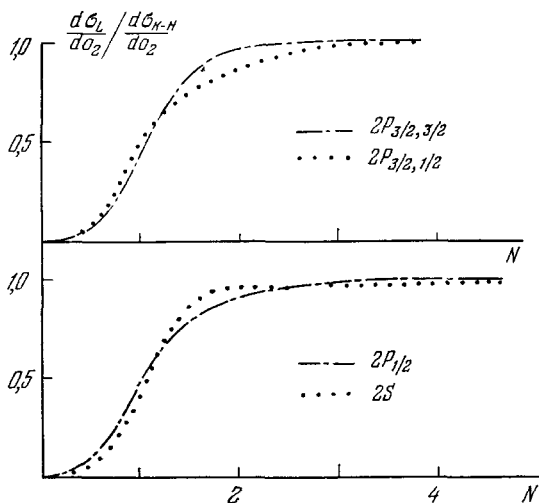


Рис. 13. Отношение сечения комптон-эффекта на электронах L -оболочки к сечению Клейна — Нишины в зависимости от «встрясочного» параметра N .

В работе ³⁰ исследовались зависимости $d\sigma_{\text{связ}}/d\sigma_{K-H}$ от «встрясочного» параметра N при рассеянии на подобо-

лочках, классифицируемых согласно релятивистской теории. Они показаны на рис. 13. Аналогичные результаты нетрудно получить и для

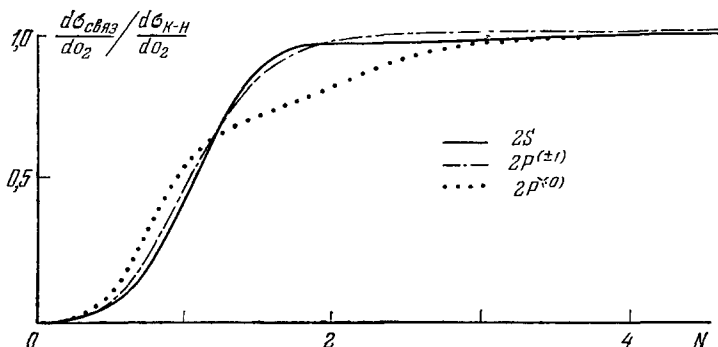


Рис. 14. Отношение сечения комpton-эффекта на электронах L -оболочки к сечению Клейна — Нишины в зависимости от «встряточного» параметра N .

нерелятивистской схемы уровней (рис. 14). Усредненное сечение комpton-эффекта, нормированное на сечение Клейна — Нишины, приведено на рис. 15, где представлены также экспериментальные данные по комpton-эффекту на атомах Pb и Th.

Глядя на рис. 11, 12, 15, можно констатировать в целом хорошее согласие между нерелятивистскими теоретическими кривыми и экспериментальными результатами. Имеющиеся расхождения обусловлены рядом причин. Из них назовем в первую очередь те, которые касаются теоретических расчетов.

Во-первых, неравенство $\omega t \ll 1$ выполняется с небольшим запасом, поэтому хорошо бы учесть поправки высших порядков к нулевому «встряточному» приближению. Далее, напомним, что выражение для «встряточного» параметра (119) получено нами в первом приближении по $\alpha Z/n$ (результаты в нулевом и первом порядке по $\alpha Z/n$ совпадают). Для учета следующих поправок можно поступить следующим образом.

Процесс рассеяния фотона на слабосвязанном электроны при большом N можно трактовать как рассеяние на свободном электроны, имеющем точно такое же распределение по импульсам, как и в связанном состоянии. Сечение комpton-эффекта на свободном, движущемся с 4-импульсом (E, \mathbf{p}) электроны имеет вид

$$\frac{d\sigma_{\text{своб}}}{d\sigma_2} = \frac{1}{2} \left[\frac{r_e m c^2}{a + (b-1) m c^2} \right]^2 \times \left\{ \frac{b-1}{a} m c^2 + \left[1 - \frac{m^2 c^4 (1 - \cos \theta)}{a (E - p c \cos \theta_1)} \right]^2 + \frac{a}{a + (b-1) m c^2} \right\}; \quad (121)$$

здесь $a = E - p c \cos \theta_2$ (определение b см. в (118)). $\theta_{1,2}$ — углы между \mathbf{p} и волновыми векторами падающего и рассеянного фотона $\mathbf{k}_{1,2}$. Вместо сечения Клейна — Нишины угловое распределение γ -квантов в комpton-эффекте на связанном электроны надо сравнивать с надлежащим образом усредненным сечением (121). Параметр N нетрудно также видоизменить, учтя поправки по степеням $\alpha Z/n$ в выражении для δk .

Однако дальнейшее теоретическое продвижение на указанном пути в настоящее время пока не требуется ввиду больших ошибок и разногласий даже между идентичными измерениями у разных авторов. Трудности, испытываемые экспериментаторами,

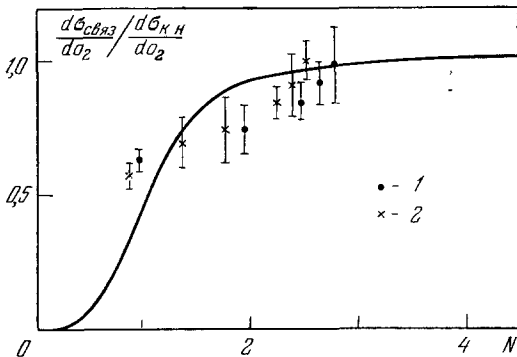


Рис. 15. Комpton-эффект на L -оболочке Pb ($Z_{\text{Я}} = 82$) и Th ($Z_{\text{Я}} = 90$).

Экспериментальные результаты: 1 — из 42, 2 — из 43.

связаны со сложным характером измерений сечений ионизации с выбиванием электрона с конкретной атомной оболочки. Вакансия, образующаяся во внутренней оболочке после выбивания оттуда электрона, живет $t \sim 10^{-16}$ сек. Затем ее занимает электрон из внешней оболочки атома, а высвечивающийся при этом рентгеновский квант используется для схемы совпадений с рассеянным квантом. В эксперименте, к сожалению, реализовать схему совпадений непросто, поскольку часть тех и других квантов поглощается в мишени и, кроме того, появляется добавочное фоновое тормозное излучение комптоновских электронов. Эти и другие побочные эффекты приводят к сильной зависимости измеренного отношения $d\sigma_{\text{связ}}/d\sigma_{K-H}$ от формы образца, угла рассеяния и других конкретных условий эксперимента (ошибки, даваемые многими авторами и показанные на рис. 11, 12, 15, относятся часто лишь к подсчету зарегистрированных событий; в качестве $d\sigma_{K-H}/d\omega_2$ используются экспериментальные угловые распределения γ -квантов при их рассеянии на образцах из Al ($Z_A = 13$) или Be ($Z_A = 4$)).

7. ДРУГИЕ ПРОЦЕССЫ СТОЛКНОВЕНИЙ

а) Излучение ядра в молекуле или кристалле

Вынужденные переходы в процессах с участием колеблющегося атома имеют место в столкновениях не только с электронной оболочкой, но и с самим ядром. Известным примером такого рода процессов является поглощение, испускание и рассеяние нейтронов атомами, находящимися в кристаллической решетке⁴⁴ или в молекуле⁴⁵.

Намного важнее с практической точки зрения, чем захват нейтронов атомами в кристаллической решетке, оказался теоретически эквивалентный ему эффект Мёссбауэра⁴⁶⁻⁴⁸. Отметим его основные особенности. Здесь надо различать три существенно разных интервала времени: 1. Время столкновения τ — это время пролета элемента волны длиной $l \sim c/\Omega$ через ядро, размеры которого во всех реальных случаях гораздо меньше l . Таким образом, $\tau \sim 1/\Omega$. 2. Время, характерное для движения атомных ядер в молекуле или в твердом теле, $1/\omega$. 3. Время жизни возбужденного состояния $T \sim 1/\Gamma$, Γ — ширина линии мёссбауэровского излучения. Средние времена T лежат в большинстве случаев в интервале от 10^{-7} до 10^{-9} сек.

Нетрудно установить соответствие между этими временами:

$$\tau \ll \frac{1}{\omega} \ll T. \quad (122)$$

В силу первого из неравенств (122), процесс излучения может трактоваться как «встряска» по отношению к медленным движениям ядра. Параметр N в данном случае равен

$$N = |k\delta R| \sim k\delta R. \quad (123)$$

Поскольку он не содержит постоянной Планка, происхождение его чисто классическое¹. Вероятность излучения колеблющегося ядра с любым изменением его колебательного состояния определяется в гармоническом приближении с помощью результатов (81), (83) или (87), соответственно, в случае квантовых или классических колебаний.

Второе из неравенств (122) играет свою роль в резонансном рассеянии мёссбауэровского излучения. Большое время жизни ядра в возбужденном состоянии по отношению к τ и $1/\omega$ позволяет две стадии процесса — резонансное поглощение и испускание без отдачи — рассматривать как совершенно независимые. В результате, вероятность резонансного рассеяния пропорциональна произведению вероятностей переходов, обусловленных двумя независимыми «встрясками». Если речь идет о кристалле, то она пропорциональна произведению двух факторов Лэмба — Мёссбауэра, содержащих, соответственно, «встрясочные» параметры $N_1 = |k_1\delta R|$ и $N_2 = |k_2\delta R|$.

До сих пор мы говорили о «естественных» движениях γ -активных ядер в молекулах или кристаллах и о появлении на фоне этого относительно медленного движения сателлитов в спектре γ -излучения. В последнее время в связи с прогрессом в развитии лазерной техники, в ряде исследований ставятся вопросы о влиянии сильных полей на раскачку атомных и молекулярных систем, чаще всего путем вынужденных внутренних переходов под действием резонансного поля. Актуальными поэтому становятся вопросы о «встрясочных» переходах на фоне вынужденных медленных движений квантовой системы при раскачке ее во внешнем поле.

При селективной раскачке, скажем, при увеличении δR для отдельного типа движений, можно добиться того, что соответствующий «встрясочный» параметр $N \sim \delta R/\hbar$, а вместе с ним и вероятности переходов, намного изменяются по сравнению со случаем, когда лазерного поля нет. Следовательно, можно выделить и изучить отдельно интересующий нас канал в довольно узком спектральном интервале (ширина этого интервала определяется условиями резонансного возбуждения, в частности, монохроматичностью лазерного луча). Из работ такого направления отметим^{49, 50}.

б) Столкновения молекул с электронами
и тяжелыми частицами

Подробнее всего из вынужденных эффектов во внешнем лазерном поле изучен в настоящее время так называемый вынужденный тормозной эффект^{1, 51} (ВТЭ) — излучение или поглощение квантов лазерного поля, индуцированное рассеянием электрона. Прямым аналогом ВТЭ является процесс квазиупругого рассеяния электрона на колеблющемся атоме. Если колебания атома классические, природа такого рассеяния очень близка к ВТЭ. В большинстве же случаев имеет место квантовый аналог ВТЭ, когда ядро совершает квантованные движения, например, в молекуле.

Есть, однако, и существенное различие между указанными процессами. Во втором из них вступает в игру тождественность налетающего электрона с электронами мишени. Заметим, что наличие $\delta \mathbf{p}$ в формуле (24) не свидетельствует еще однозначно о зависимости амплитуды только от переданного импульса. Ожидать отличий следует, очевидно, в процессах столкновений атомов или молекул с электронами, когда при расчете сечений надо учитывать обменные эффекты.

На примере рассеяния электрона на K -оболочке гомоядерной двухатомной молекулы можно показать, что при учете обменных взаимодействий влияние колебаний ядер в молекуле (рассмотрим, скажем, каналы рассеяния только с возбуждением колебаний) характеризуется уже не единственным параметром N , содержащим переданный импульс, а еще тремя параметрами, включающими в себя вместо $\delta \mathbf{p}$ комбинации \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 и $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ ($\mathbf{p}_{1,2}$ — импульсы падающего и рассеянного электронов).

Проследим, как появляется «встряточный» параметр N в самом общем случае при столкновении молекулы с быстрой заряженной частицей. Пусть быстрая частица, обладающая зарядом Ze , массой m и импульсом \mathbf{p}_0 , сталкивается с молекулой мишени и ионизирует ее. Обозначим энергию и импульс выбиваемого электрона через E_2 и \mathbf{p}_2 , а импульс рассеиваемой частицы в конечном состоянии через \mathbf{p}_1 . Трехжды дифференциальное сечение такого процесса в первом борновском приближении записывается следующим образом⁵²:

$$\frac{d^3\sigma}{dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = \frac{p_1}{p_0} \left(\frac{2mZe}{p^2} \right)^2 \langle \Psi_f | \sum_j e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_j/\hbar} | \Psi_i \rangle|^2, \quad (124)$$

где Ψ_i и Ψ_f — волновые функции начального и конечного состояний рассеивающей системы, $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$, $d\Omega_{1,2}$ — элементы телесных углов, в которых лежат векторы $\mathbf{p}_{1,2}$; суммирование по j ведется по всем электронам в молекуле.

В адиабатическом приближении

$$\Psi = \Phi(\mathbf{r}, R) \Lambda(Q) \Theta(\Phi), \quad (125)$$

где $\Phi(\mathbf{r}, R)$ — электронная, $\Lambda(Q)$ — колебательная и $\Theta(\Phi)$ — вращательная волновые функции; \mathbf{r} и R — совокупности электронных и ядерных координат, Q — координаты нормальных колебаний, Φ — углы Эйлера, определяющие ориентацию молекулы в пространстве. Электронная координатная волновая функция конечного состояния представляется в виде линейной комбинации произведений типа $\Phi_{\text{ион}}\Phi(\mathbf{p}_2)$.

Как правило, интерес представляет сечение, просуммированное по всем конечным состояниям образующегося иона:

$$\frac{d^3\sigma}{dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2} \approx \frac{p_1}{p_0} \left(\frac{2mZe}{p^2} \right)^2 \langle \Lambda_i \Theta_i | | \mathcal{M} |^2 | \Lambda_i \Theta_i \rangle, \quad (126)$$

$$\mathcal{M}(R) = \langle \Phi(\mathbf{p}_2) | \sum_j e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_j/\hbar} | \Phi_i(\mathbf{r}, R) \rangle. \quad (127)$$

Записью $\mathcal{M}(R)$ мы специально подчеркиваем, что матричный элемент между электронными состояниями зависит от совокупности ядерных координат. Зависимость от R в (127) определяется вектором $\delta \mathbf{p} \approx \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$, поэтому при выполнении интегрирования в формуле (126) по колебательным координатам появится характерный параметр

$$N \sim \frac{1}{\hbar} \delta \mathbf{p} \cdot \delta R.$$

Рассмотрим, для конкретности, каналы с возбуждением колебаний в двухатомной молекуле при неизменном электронном состоянии, предполагая, что ось молекулы ориентирована в пространстве в определенном направлении. Сечение столкновения с переходом молекулы в фиксированное колебательное состояние, $|v\rangle \rightarrow |v+n\rangle$, содержит в себе характерный двухцентровый множитель

$$\chi = 1 + (\delta_{n, 2l} - \delta_{n, 2l+1}) \cos(\mathbf{q}\mathbf{R}_0), \quad (128)$$

где $\hbar q$ — переданный ядрам импульс, R_0 — равновесное межъядерное расстояние. Сечение столкновения с переходом из $|v\rangle$ во все колебательные состояния в гармоническом приближении описывается формулой

$$d\sigma = d\sigma_0 [1 + e^{-N^2 L_v (2N^2) \cos(qR_0)}]. \quad (129)$$

Осциллирующий член в сечении (129) (добавка к единице в квадратной скобке) специфичен именно для молекул и отсутствует в случае рассеяния на атомах. Как видно из выражения (129), эта молекулярная специфика полностью исчезает при больших значениях «встряточного» параметра. При этом многоцентровость в электронном распределении в молекуле вообще никак не проявляется.

Мы благодарим В. П. Крайнова, Б. М. Смирнова и М. В. Федорова за полезные обсуждения изложенных результатов.

Дополнение при корректуре. 1. В самом общем случае, когда коммутатор $[\hat{V}(t), \hat{V}(t')]$ является каким угодно оператором, теория внезапных возмущений видоизменяется только в том отношении, что в нулевом порядке по \hat{V} оператор временной эволюции $\hat{S}_0(t, t')$ записывается с помощью разложений Магнуса или Фера, в которые, как уже указывалось, входят последовательные коммутаторы операторов $\hat{V}(t)$, взятых в разные моменты времени. Вся же схема расчета и, в частности, формулы для вычисления высших поправок по степеням \hat{V} от (19) — (20) остаются прежними.

2. Формальной заменой $\hat{\mathcal{H}}_0 t$ на $\int_t^t dt \hat{\mathcal{H}}_0(t)$ (при условии, конечно, что $[\hat{\mathcal{H}}_0(t), \hat{\mathcal{H}}(t')] \equiv 0$) все результаты гл. 2 непосредственно обобщаются на тот случай, когда невозмущенный гамильтониан также зависит от времени. Для нахождения амплитуд переходов при внезапных возмущениях здесь удобнее использовать представление Шрёдингера, перейдя обратно от вычисленного с нужной степенью точности оператора временной эволюции $\hat{S}(t, t')$ к оператору $\hat{U}(t, t')$.

Институт атомной энергии
им. И.В. Курчатова

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Дыхне А. М., Юдин Г. Л. — УФН, 1977, т. 121, с. 157.
2. Мигдал А. Б., Крайнов В. П. Приближенные методы квантовой механики. — М.: Наука, 1966.
3. Мигдал А. Б., Качественные методы в квантовой теории. — М.: Наука, 1975.
4. Freedman M. S. — Ann. Rev. Nucl. Sci., 1974, v. 24, p. 209.
5. Шифф Л. Квантовая механика. — И.: ИЛ, 1959.
6. Alder K., Winther A. — Kgl. Danske. Videnskab. Selskab. Mat. Fys. Medd., 1960, v. 32, Nr. 8.
7. Robinson D. W. — Helv. Phys. Acta, 1963, v. 36, p. 140.
8. Takayangi K. — Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 1963, Suppl., v. 25, p. 43.
9. Mizushima M. — Ibid., 1967, Suppl., v. 40, p. 207.
10. Витлина Р. З., Чаплик А. В. — ЖЭТФ, 1973, т. 65, p. 458.
11. Бор О., Моттelson Б. Структура атомного ядра. — М.: Мир, 1971.
12. Айзенберг И., Грайнер В. Микроскопическая теория ядра. — М.: Атомиздат, 1976.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974.
14. Wilcox R. M. — J. Math. Phys., 1967, v. 8, p. 962.
15. Magnus W. — Comm. Pure and Appl. Math., 1954, v. 7, p. 649.
16. Pechukas Ph., Light J. C. — J. Chem. Phys., 1966, v. 44, p. 3897.
17. Fer F. — Bull. Class. Sci. Acad. Roy. Belg., 1958, t. 44, p. 818.
18. Weiss G., Maradudin A. A. — J. Math. Phys., 1962, v. 3, p. 771.
19. Kumar K. — Ibid., 1965, v. 6, p. 1923, 1928.
20. Feynman R. P. — Phys. Rev., 1950, v. 80, p. 440; 1951, v. 84, p. 108.
21. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968.
22. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, 1971.
23. Каплан И. Г., Маркин А. П. — ЖЭТФ, 1973, т. 64, с. 424.
24. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. — М.: Наука, 1974. — Т. 2.
25. Parr R. G., White R. J. — J. Chem. Phys., 1968, v. 49, p. 1059.
26. Simons G., Parr R. G., Finlan J. M. — Ibid., 1972, v. 59, p. 3229.
27. Simons G. — Ibid., 1974, v. 61, p. 369.

27. Bickes R. M. Jr., Bernstein R. B.— Chem. Phys. Lett., 1974, v. 26, p. 457.
28. Мигдал А.— ЖЭТФ, 1939, т. 9, с. 1163.
29. Bloch B. J., Mendelson L. B.— Phys. Rev. Ser. A, 1974, v. 9, p. 129.
30. Юдин Г. Л.— ДАН СССР, 1976, т. 230, с. 1095.
31. Каплан И. Г., Юдин Г. Л.— ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 9.
32. Trammell G. T.— Phys. Rev., 1962, v. 126, p. 1045.
33. Whittingham I. B.— J. Phys. Ser. A, 1971, v. 4, p. 21.
34. Motz J. W., Missoni G.— Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 1458.
35. Shimizu S., Nakayama Y., Mukoyama T.— Ibid. Ser. A, 1965, v. 140, p. 806.
36. Reddy A. R., Lakshminarayana V., Jnanananda S.— Ind. J. Pure and Appl. Phys., 1966, v. 4, p. 371.
37. Baba Prasad P. N., Kane P. P.— J. Res. Nat. Bur. Stand. Ser. A, 1974, v. 78, p. 461.
38. Reddy A. R., Parthasaradhi K., Lakshminarayana V., Jnanananda S.— Ind. J. Pure and Appl. Phys., 1968, v. 6, p. 255.
39. Reddy A. R., Lakshminarayana V., Jnanananda S.— Proc. Phys. Soc., 1967, v. 91, p. 71.
40. Pingot O.— J. de Phys., 1971, t. 32, p. 413.
41. Pingot O.— Ibid., 1972, t. 33, p. 189.
42. Swamy S. T. P. V. J., Murty D. S. R.— Phys. Lett. Ser. A, 1975, v. 55, p. 17.
43. Swamy S. T. P. V. J., Murty D. S. R.— Physica. Ser. C, 1976, v. 84, p. 289.
44. Lamb W. E.— Phys. Rev., 1939, v. 55, p. 190.
45. Zemach A. C., Glauber R. J.— Ibid., 1956, v. 101, p. 118, 129.
46. Фрауэнфельдер Г. Эффект Мёссбауэра.— М.: Атомиздат, 1964.
47. Киттель Ч., Квантовая теория твердых тел.— М.: Наука, 1967.
48. Лицкин Г., Квантовая механика.— М.: Мир, 1977.
49. Летохов В. С., Phys. Rev. Ser. A, 1975, v. 12, p. 1954.
50. Летохов В. С., Миногоин В. Г.— ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 1569; 1976, т. 70, с. 794.
51. Бункин Ф. В., Федоров М. В.— ЖЭТФ, 1965, т. 49, p. 1215.
52. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений.— М.: Мир, 1969.