

N. F. MOTT and H. S. W. MASSEY

МОТТ и МЕССИ

THEORY OF ATOMIC
COLLISIONS

ТЕОРИЯ АТОМНЫХ
СТОЛКНОВЕНИЙ

ПЕРЕВОД С АНГЛИЙСКОГО
Т. А. КОНТОРОВОЙ

ПОД РЕДАКЦИЕЙ
проф. Я. И. ФРЕНКЕЛЯ

Цена 6 руб., перепл. 1 руб.

OXFORD
AT THE CLARENDON PRESS
1933

ОНТИ • ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ ОБЩЕТЕХНИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
ЛЕНИНГРАД 1936 МОСКВА

БИБЛИОТЕКА
И Ф И

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Предлагаемая книга предназначается для читателей, знакомых с основными принципами волновой механики и желающих основательно ознакомиться с применением этих принципов к явлениям столкновения элементарных частиц — электронов, атомных ядер, ионов, атомов и молекул — друг с другом. В виду малости этих частиц, классическая механика описывает эти явления в весьма грубом приближении, и то лишь для столкновений „упругого“ характера, т. е. таких, при которых энергия относительного движения сталкивающихся частиц не переходит в их внутреннюю энергию (если хотя бы одной из обеих частиц является атом).

Неупругие столкновения, связанные с изменением внутренней энергии подобных частиц и в частности с их ионизацией, оказывается возможным описать только на основе квантовой механики. Точно так же классическая механика оказывается не в состоянии передать ряд тонкостей, связанных с тождественностью сталкивающихся частиц.

Авторы известны своими оригинальными работами в этой области. В частности Мотту принадлежит ряд результатов, относящихся к влиянию „спина“ при столкновении электронов с атомами или друг с другом, в связи с принципом Паули, а Мессе — ряд результатов, относящихся к упругим и неупругим столкновениям между относительно тяжелыми сложными частицами — атомами и молекулами.

Таким образом книга Мессе и Мотта имеет не только те достоинства, которые связаны с полнотой трактовки, но и преимущества сочинения, обладающего значительной степенью оригинальности.

Для полноты авторы дают в начале книги (гл. I) краткое изложение общих принципов волновой механики, страдающее не только недостаточной ясностью, но и некоторыми принципиальными ошибками, отмеченными мной в примечаниях.

Читатель, знакомый с общими основами волновой механики, может спокойно пропустить эту первую главу; в противном случае ему следует предварительно познакомиться с этими принципами по какой-нибудь другой книге (например по моей „Волновой механике“ или „Волновой механике“ Герни).

Для русского издания авторами дополнен ряд глав и написана глава XVI об ядерных столкновениях.

Я. Френкель

Ленинград,
январь 1936 г.

ВВЕДЕНИЕ

Многие из наиболее существенных успехов современной физики были достигнуты в результате изучения поведения пучков заряженных частиц. Исследования Томсона и других физиков над катодными лучами привели к открытию электрона и измерению отношения его заряда к массе. С помощью аналогичных методов Кауфману удалось установить релятивистское изменение массы со скоростью, а за последнее десятилетие усовершенствование этого метода Астоном привело к определению массовых дефектов атомов. Эти опыты дали нам сведения о природе самих заряженных частиц. Когда природа их была понята, пучки заряженных частиц оказались наиболее употребительным средством исследования атомной структуры. Наиболее ценные в этом отношении сведения могут быть получены в результате бомбардировки материи, обычно в форме газа или тонкой фольги, при таких условиях, когда можно пренебречь долей падающих частиц, которые испытывают эффективные столкновения больше нежели с одним атомом. Мы можем при этом исследовать энергию и угловое распределение рассеянных частиц или же излучение, даваемое атомом.

К наиболее ранним опытам этого типа относится опыт Резерфорда, подвергнувшего тонкую металлическую фольгу бомбардировке потоком α -частиц. Из соотношения между числом рассеянных частиц и толщиной фольги ему удалось показать, что в условиях опыта имело место простое, т. е. однократное, рассеяние; далее, изучение изменения рассеяния с изменением угла привело его к формулированию постулата, согласно которому в центре атома находится тяжелое ядро. Дальнейшие усовершенствования этого метода привели Резерфорда к открытию аномального рассеяния и искусственному разложению ядер; этот метод оказался одним из наиболее пригодных для исследования структуры ядра.

Опыты по бомбардировке атомов электронами данной энергии в руках Франка, Герца и других исследователей привели к наиболее непосредственному доказательству существования стационарных состояний, постулированных Бором в 1913 году. Оказалось возможным измерить минимальную энергию, требующуюся для возбуждения атома, а также исследовать распределение скоростей электронов после столкновения и показать, что рассеянные электроны либо не теряют энергии, либо потеря энергии превышает первый резонансный потенциал.

Во всех этих опытах внимание сосредоточивалось в основном на атоме, а не на сталкивающейся с ним частице. Ведь именно атом обладает планетарной структурой, существует в стационарных состоя-

ниях и излучает кванты энергии. Теоретические исследования вплоть до последнего времени касались поэтому в основном вопросов о стационарных состояниях атома. Более точные и полные данные об энергиях этих состояний были получены в результате развития спектроскопических методов исследования.

Имели место также и попытки получения теоретических значений вероятности потери энергии сталкивающейся частицей. Так, например, в 1913 году Бор дал полуклассическую теорию потери энергии электронами и α -частицами при прохождении их через материю; при этом было получено выражение для задерживающей способности вещества, находящееся в качественном согласии с опытными данными. В 1923 году Крамерс дал теорию излучения частицей при столкновении ее с неподвижной мишенью. Эти формулы, хотя и весьма употребительные при рассмотрении экспериментальных данных, лишены, однако, сколько-нибудь солидного теоретического базиса.

Одной из заслуг новой квантовой теории является то обстоятельство, что она однозначным образом отвечает на вопросы, связанные с определением вероятностей и интенсивностей в задачах теории столкновений. Первое указание на недостаточность применения классической механики, дополненной квантовыми условиями, было получено в результате работ Рамзауера, показавшего, что для некоторых атомов эффективное сечение для столкновения с медленными электронами во много раз меньше, нежели газо-кинетическое сечение. Чрезвычайно богатый экспериментальный материал был получен уже после построения новой теории, при чем накопление его до некоторой степени стимулировалось последней. Так, например, работы Дэвиссона и Джермера, Томсона и многих других авторов, посвященные диффракции электронов кристаллами, дают ясное доказательство волновой природы электрона. Имеется также богатый экспериментальный материал, касающийся диффракции электронов от атомов и молекул газов, большая часть которого может быть объяснена вполне удовлетворительным образом. Имеются также некоторые указания на возможность подтверждения принципа Паули из рассмотрения явлений столкновения.

Новая теория не только объясняет эти новые и до некоторой степени удивительные явления; она дает также формулы для задерживающей способности различных материалов для α - и β -частиц, значения газо-кинетического сечения атомов, а также многих других величин, попытки вычисления которых в классической теории оказались безуспешными. Формулы, даваемые квантовой теорией, находятся обычно в лучшем согласии с опытными данными, нежели формулы прежней теории; остающиеся расхождения обусловлены, по всей вероятности, приближенностью математических методов, применяющихся при решении уравнений, а не недостатками самой теории.

Во вступительной главе этой книги обсуждаются методы новой квантовой теории; далее эти методы применяются к рассмотрению задач о столкновениях между материальными частицами, при чем иллюстрируется согласие получающихся результатов с опытными данными.

ГЛАВА I

ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ

§ 1. Волновая функция

В этой главе мы сформулируем законы волновой механики не в их наиболее общей форме, применимой к любой сложной системе частиц, а в более простом виде, пригодном лишь при изучении движения отдельной заряженной частицы в некотором силовом поле. Излагаемые при этом соображения могут быть также применены к рассмотрению экспериментальных данных о поведении электронного пучка при условии, что взаимодействием между различными электронами в этом пучке можно пренебречь, т. е. что каждый электрон ведет себя так, как если бы остальных электронов не существовало. В действительности это могло бы иметь место, конечно, лишь в том случае, если бы плотность заряда в пучке была исчезающе малой.

Мы установим законы волновой механики с целью применения их к изучению движения свободного электрона; так как соответствующие опыты производятся обычно с электронными пучками, мы сформулируем прежде всего законы, характеризующие поведение стационарных пучков.

Законы эти могут быть найдены следующим образом. В самом процессе экспериментального исследования поведения электронов мы имеем обычно дело с электроном как с частицей (вспышка на экране, отброс счетчика Гейгера). Если же мы, однако, хотим знать, сколько электронов находится в некотором объеме, или же сколько электронов вблизи данной точки проходит в единицу времени через единицу площади — мы должны сделать предположение о наличии волны (волны де-Брогля). Амплитуда и фаза этой волны в данной точке в данный момент времени определяется как некоторая (комплексная) функция положения¹⁾ $\psi(x, y, z, t)$ (волновая функция). Наличие этой „волны“ обнаруживается следующим образом: если $d\tau$ — элемент объема, содержащий точку (x, y, z) , то вероятность нахождения электрона в момент t в элементе объема $d\tau$ определяется выражением

$$|\psi(x, y, z, t)|^2 d\tau.$$

Среднее число электронов в объеме τ , достаточно большом, чтобы содержать большое количество электронов, равняется таким образом:

$$\int |\psi(x, y, z, t)|^2 d\tau.$$

¹⁾ x, y, z — декартовы координаты, взятые по отношению к некоторым неподвижным осям; t — время.

Интегрирование производится здесь по объему τ . Следует подчеркнуть, что эта вероятность относится к результатам возможных экспериментов; величина $|\psi|^2 d\tau$ определяет вероятность того, что электрон был бы найден в элементе объема $d\tau$, если бы оказался осуществленным соответствующий опыт.

Число электронов, проходящих в единицу времени через единицу поверхности, определяется уравнением (18).

Покажем теперь, как вычисляется волновая функция ψ , точно описывающая поведение пучка электронов при любых данных условиях; метод вычисления будет, конечно, зависеть от характера подразумеваемого эксперимента. Мы можем различать два типа опытов: 1) опыты, при которых мы имеем дело со стационарным потоком электронов, например, с катодными лучами в хорошо откачанной разрядной трубке, и 2) при которых мы имеем дело с потоком, интенсивность которого меняется во времени. К опытам второго типа относится исследование поведения электронов в разрядной трубке в первый момент пуска тока (см. § 8).

§ 2. Волновая механика стационарных электронных пучков

Рассмотрим прежде всего вопрос о поведении стационарных пучков электронов. В этой главе мы ограничимся формулировкой нерелятивистской теории, справедливой лишь в том случае, когда скорость электронов мала по сравнению со скоростью света. Для определения траектории электронного пучка мы должны знать функцию ψ ; величина $|\psi|^2$ будет равняться при этом числу электронов в единице объема вблизи данной точки. При заданных условиях опыта мы сможем таким образом вычислить $|\psi|$ для любой точки пространства.

Предположим, например, что пучок электронов, обладающих известной энергией, проходит через щель S в хорошо откачанной посуде, где электроны описывают криволинейную траекторию, обусловленную наличием электрического поля. Мы можем при этом, исходя из экспериментальных условий, вычислить функцию $|\psi|^2$; если наши правила определения $|\psi|^2$ являются верными, то должно оказаться, что вне области нахождения электронов величина $|\psi|^2$ обращается в нуль, внутри же этой области она равняется наблюдаемой плотности электронов.

Определим прежде всего длину волны при данных условиях. С этой целью можно использовать непосредственные экспериментальные данные¹⁾; наблюдения над дифракцией электронов кристаллами показывают, что если электроны ускоряются в поле известного потенциала, то длина λ соответствующих волн определяется формулой

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mW}}, \quad (1)$$

где W — кинетическая энергия отдельного электрона. Это соотно-

¹⁾ G. P. Thomson, The wave mechanics of free electrons (гл. IV).

шение было получено в 1925 г. де-Броглем на основании теоретических соображений¹⁾.

W — величина, которая может быть непосредственно измерена, так как $\frac{W}{e}$ — падение потенциала между источником электронов, где они приближенно могут рассматриваться как находящиеся в состоянии покоя, и той точкой, где производится измерение длины волны. Для рассмотренного выше опыта имеет место следующее соотношение:

$$W = W_0 - V(x, y, z),$$

где W_0 — кинетическая энергия электронов при прохождении их через щель S , $V(x, y, z)$ — потенциальная энергия электрона в точке (x, y, z) , причем $V = -e\varphi(x, y, z)$, где φ — электростатическая разность потенциалов между S и точкой (x, y, z) . Длина волны в этом случае может быть определена, таким образом, в любой точке пространства. Эти результаты оказываются, однако, несправедливыми, если градиенты потенциалов столь велики, что W претерпевает заметные изменения на расстоянии порядка длины волны ($\sim 10^{-8}$ см)²⁾. Подобные поля имеются только во внутриаомных областях.

Для определения волновой функции мы должны также знать так называемые „граничные условия“. Последние зависят исключительно от рассматриваемых условий эксперимента; в вышеописанном опыте „граничные условия“ заключаются в знании состояния волны на поверхности щели, т. е. в знании ее амплитуды, длины и фазы. Все эти величины, за исключением фазы, определяются условиями опыта; фазе же может быть приписано любое значение, так как оно не повлияет на $|\psi|$; из аналогии с другими видами волновых процессов ясно, что эти условия являются достаточными для определения волны во всех точках пространства.

Для вычисления функции ψ мы должны также знать волновое уравнение, которому она удовлетворяет. Любой монохроматический ряд волн в однородной изотропной среде должен удовлетворять уравнению

$$\nabla^2 \psi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0,$$

где λ — длина волны. Если среда неоднородна, т. е. λ является функцией положения, то волновая функция ψ будет удовлетворять этому уравнению приближенно, при условии, что на расстоянии порядка λ изменение λ мало³⁾. Подставляя в предыдущее уравнение выражение

$$\lambda = h / \{ 2m(W_0 - V) \}^{\frac{1}{2}},$$

¹⁾ См. например Френкель, Волновая механика, ч. I, стр. 37.

²⁾ Последнее ограничение представляется ничем не оправданным.

(Прим. ред.)

³⁾ Это утверждение, связанное с предыдущим ограничением, также совершенно неправильно: уравнение Шредингера (2) остается справедливым при сколь угодно больших градиентах потенциала.

(Прим. ред.)

мы получаем

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W_0 - V) \psi = 0 \quad (2)$$

— волновое уравнение Шредингера.

Поставленное выше условие, согласно которому на расстоянии порядка λ длина волны не должна претерпевать заметных изменений, может быть записано в следующем виде:

$$|\text{grad } V| \lambda \ll W. \quad (3)$$

Оно удовлетворяется, очевидно, для всех макроскопических полей. С помощью соотношения (3) можно показать, что поведение электронного пучка, предсказываемое уравнением Шредингера, совпадает с результатами, вытекающими из механики Ньютона. Действительно, если пучок волн движется в среде с переменным коэффициентом преломления μ , то траектория пучка является криволинейной; ее радиус кривизны R в любой точке определяется хорошо известной формулой

$$\frac{1}{R} = -\frac{\partial}{\partial n} \lg \mu.$$

Коэффициент преломления μ равняется отношению длины волны в рассматриваемой точке к длине волны в свободном пространстве (т. е. при отсутствии внешних сил); в нашем случае:

$$\mu = [W_0 / (W_0 - V)]^{1/2}$$

и следовательно

$$\frac{1}{R} = -\frac{\partial V}{\partial n} / 2(W_0 - V). \quad (4)$$

Согласно механике Ньютона, произведение массы m на ускорение $\frac{v^2}{R}$,

нормальное к траектории электронов, должно равняться $-\frac{\partial V}{\partial n}$ составляющей внешнего поля в нормальном направлении. Подставляя

$$mv^2 = 2(W_0 - V),$$

получаем уравнение (4). Как волновая, так и классическая механики приводят, таким образом, в данном случае к одним и тем же результатам.

Волновая механика приводит к отличным от классической механики результатам только в том случае, когда она применяется для описания поведения электронов в сильных полях, существующих внутри атомов. Прежде чем применять уравнение Шредингера (2) к подобного рода задачам, мы остановимся на рассмотрении двух вопросов. Во-первых, потенциальная энергия электрона в точке (x, y, z) уже не является экспериментально определенной величиной. Согласно принципу неопределенности, скорость электрона, наблюдаемого в точке (x, y, z) , неизвестна;

изменение $V(x, y, z)$ его кинетической энергии при переходе из свободного от сил пространства в точку (x, y, z) не является поэтому экспериментально наблюдаемой величиной. Мы можем лишь сказать, что функция V , будучи подставленной в уравнение Шредингера, приводит к согласующимся с опытными данными результатам. Если нас интересует поведение электрона в поле ядра заряда E , мы воспользуемся, конечно, прежде всего кулоновым полем:

$$V(x, y, z) = -\frac{Ez}{r},$$

определяющим потенциальную энергию одного макроскопического заряженного тела в поле другого; подобного рода предположение оправдывается, однако, лишь тем, что оно приводит к согласующимся с опытными данными результатам; априорного подтверждения правильности приведенной выше формы потенциала мы не имеем, так как $V(r)$ не является экспериментально измеримой величиной.

Остается теперь выяснить, является ли уравнение (2) точным уравнением, с помощью которого может быть учтено воздействие атомных полей. Мы видели, что это уравнение так же, как и вероятностная интерпретация ψ (при условии, что мы имеем дело с медленно меняющимися полями), основывается на опытных данных о дифракции электронов кристаллами. Предположение о возможности применения этого уравнения к атомным полям является принципиально новым. Оно оправдывается лишь в том случае, если приведет к согласующимся с экспериментальными данными результатам. Простейшим способом проверки теории могло бы послужить получение из нее закона сохранения заряда, согласно которому среднее число электронов, входящих в некоторый ограниченный объем, равняется числу электронов, выходящих из этого объема. Этот вопрос будет рассмотрен подробнее в § 7.

Мы будем в дальнейшем пользоваться волновым уравнением Шредингера, так как оно является простейшим волновым уравнением, дающим длину де-Броглевской волны для медленно меняющихся полей, и обеспечивающим сохранение заряда, т. е. числа электронов, для любых полей.

§ 3. Примеры волновых функций, описывающих стационарные электронные пучки. Бесконечная плоская волна

Бесконечно широкий пучок электронов, движущихся слева направо вдоль оси z , может быть описан с помощью волновой функции¹⁾

$$\psi = A \exp 2\pi i \left(\frac{z}{\lambda} - vt \right), \quad (5)$$

где λ — длина волны, определяющаяся выражением

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2Wm}},$$

¹⁾ \exp и обозначает экспоненциальную функцию e^x . (Прим. ред.).

W — кинетическая энергия, а ν — частота, при чем (см. § 8):

$$\nu = \frac{W}{h}.$$

Число электронов в единице объема равняется AA^* , а число электронов, проходящих в единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярной к оси z , равняется AA^*v , где v определяется соотношением:

$$\frac{1}{2} mv^2 = W.$$

§ 4. Пучок электронов в свободном от сил пространстве

Рассмотрим пучок электронов, образующийся в результате прохождения электронов через круглое отверстие радиуса a , имеющееся в экране. Начало координат выберем в центре отверстия, оси x и y расположим в плоскости экрана. Движение электронов будет, таким образом, совершаться вдоль оси z . Построим нашу волновую функцию путем суперпозиции плоских волн длины λ , распространяющихся в направлениях почти параллельных оси z , таким образом, чтобы в плоскости xy функция ψ была отлична от нуля лишь в области, занимаемой круглым отверстием. Уравнение плоской волны, распространяющейся в направлении, определяемом

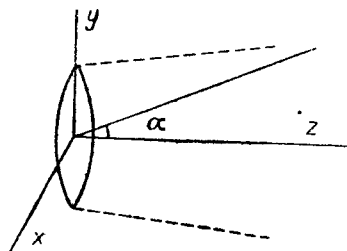


Рис. 1.

полярными углами ¹⁾ α и β , имеет в таком случае следующий вид (в момент времени $t = 0$):

$$A \exp \left[\frac{2\pi i}{\lambda} (z \cos \alpha + x \sin \alpha \cos \beta + y \sin \alpha \sin \beta) \right].$$

Отсюда следует, что наша волновая функция ψ должна иметь форму:

$$\psi = \iint A(\alpha, \beta) \exp \left[\frac{2\pi i}{\lambda} (z \cos \alpha + x \sin \alpha \cos \beta + y \sin \alpha \sin \beta) \right] d\alpha d\beta, \quad (6)$$

где $A(\alpha, \beta)$ выбрано таким образом, что ψ обращается в нуль во всех точках плоскости xy за исключением области, занимаемой круглым отверстием. Переходя к сферическим координатам (r, θ, φ) , получим

$$\psi = \iint A(\alpha, \beta) \exp \left[\frac{2\pi i}{\lambda} r \left\{ \cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta) \right\} \right] d\alpha d\beta.$$

¹⁾ $l = \sin \alpha \cos \beta$, $m = \sin \alpha \sin \beta$, $n = \cos \alpha$, где l, m, n — направляющие косинусы.

Из соображений симметрии ясно, что A зависит только от α ; выполнив интегрирование по β , получаем

$$\psi = 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} A(\alpha) d\alpha \exp \left(\frac{2\pi i r}{\lambda} \cos \theta \cos \alpha \right) J_0 \left(\frac{2\pi r}{\lambda} \sin \theta \sin \alpha \right). \quad (7)$$

где J_0 — функция Бесселя.

Для определения $A(\alpha)$, предположим, что в плоскости xy , т. е. в плоскости $\theta = \frac{\pi}{2}$, ψ равна некоторой заданной функции $f(r)$; мы имеем таким образом:

$$f(r) = 2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} A(\alpha) d\alpha J_0 \left(\frac{2\pi r}{\lambda} \sin \alpha \right). \quad (8)$$

$A(\alpha)$ может быть определено с помощью этого интегрального уравнения.

Простейшее выражение для $f(r)$:

$$f(r) = B \exp \left(-\frac{r^2}{a^2} \right). \quad (9)$$

Практически $f(r)$ должно было бы иметь более сложный вид, будучи постоянным внутри отверстия ($r < a$) и спадая некоторым неправильным образом до нуля на его границах. Мы будем, однако, пользоваться простейшей формой (9), так как с ее помощью оказывается возможным точное решение уравнения (8). Положим:

$$A(\alpha) = C e^{-\left(\frac{\sin \alpha}{\sigma}\right)^2} \sin \alpha \cos \alpha,$$

где

$$\sigma = \frac{\lambda}{\pi a}, \quad C \pi \sigma^2 = B.$$

Уравнение (8) будет при этом удовлетворяться ¹⁾, если мы заменим верхний предел интегрирования через ∞ , что возможно в силу соотношения $\sigma \ll 1$.

Остается теперь проинтегрировать выражение (7). Так как основную роль при этом играют малые значения α , то мы можем положить:

$$\psi = 2\pi C \int_0^{\infty} e^{-\frac{\alpha^2}{\sigma^2}} \exp \left[\frac{2\pi i r \cos \theta}{\lambda} \left(1 - \frac{1}{2} \alpha^2 \right) \right] J_0 \left(\frac{2\pi r \alpha}{\lambda} \sin \theta \right) \alpha d\alpha.$$

¹⁾ См. Watson, Theory of Bessel Functions, стр. 393.

Мы пользуемся формулой: $\int_0^{\infty} J_0(at) e^{-t^2/\sigma^2} t dt = \frac{1}{2} \sigma^2 e^{-\frac{1}{4} a^2 \sigma^2}$.

что сведется к

$$\pi C \left\{ \frac{1}{\sigma^2} - \frac{\pi i r \cos \theta}{\lambda} \right\}^{-1} \exp \left[- \frac{\pi^2 r^2}{\lambda^2} \sin^2 \theta \left\{ \frac{1}{\sigma^2} - \frac{\pi i r \cos \theta}{\lambda} \right\}^{-1} \right] e^{\frac{2\pi i z}{\lambda}} \quad (10)$$

Это выражение и представляет собой искомую волновую функцию. Число частиц в единице объема равняется $|\psi|^2$; при больших r эта величина стремится к

$$\left(\frac{C\lambda}{r} \right)^2 \exp(-2 \sin^2 \theta / \sigma^2),$$

т. е. принимает вид:

$$|\psi|^2 \sim \left(\frac{\pi B a^2}{\lambda r} \right)^2 \exp(-2\pi^2 a^2 \sin^2 \theta / \lambda^2). \quad (11)$$

Это соотношение хорошо иллюстрирует явление дифракции пучка электронов.

§ 5. Одномерные задачи

Предположим, что пучок электронов, аналогичный рассмотренному в предыдущем параграфе, движется вдоль оси z и попадает в поле, меняющееся только в направлении этой оси, так что потенциальная энергия электрона в этом поле имеет вид $V(z)$. Задача заключается в выяснении поведения пучка в таком поле.

В подобного рода задачах зависимость ψ от x и y не является существенной; для удобства вычислений рассмотрим падающий пучок бесконечной ширины, описывающийся с помощью бесконечной плоской волны. Полная волновая функция ψ будет в таком случае зависеть только от z и будет удовлетворять волновому уравнению:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W - V) \psi = 0, \quad (12)$$

где W — кинетическая энергия отдельного электрона в точке $V=0$.

В качестве примера ¹⁾ исследуем поведение пучка электронов, падающих на потенциальный барьер, т. е. движущихся в поле, для которого:

$$V=0 \quad \text{при } z < 0$$

$$V=U \quad \text{при } z > 0.$$

¹⁾ Вопрос о прохождении электронов через потенциальные барьеры разобран в различных учебниках. См., например, *Фрейнкель*, Волновая механика, т. I, § 15; *Condon and Morse*, Quantum Mechanics, стр. 222; *Condon*, Rev. Mod. Phys. 3, 43, 1931; *Nordheim*, Phys. Zs. 30, 177, 1929.

Предположим, что $U < W$. Волну, падающую на потенциальный барьер, мы представим в следующем виде:

$$A \exp(ikz) \quad (z < 0),$$

где

$$k = 2\pi m v / h = 2\pi (2mW)^{1/2} / h.$$

Эта функция характеризует пучок электронов, движущихся со скоростью v , в котором в единицу времени через единицу площади поперечного сечения проходит AA^*v электронов. Отраженный пучок характеризуется функцией

$$B \exp(-ikz) \quad (z < 0),$$

прошедший пучок — функцией

$$C \exp(ik'z) \quad (z > 0),$$

где

$$k' = 2\pi m v' / h = 2\pi [2m(W - U)]^{1/2} / h.$$

Полная волновая функция имеет, таким образом, следующий вид:

$$\psi = A \exp(ikz) + B \exp(-ikz) \quad (z < 0)$$

$$\psi = C \exp(ik'z) \quad (z > 0).$$

Граничные условия, которым волновая функция должна удовлетворять при $z=0$, заключаются в непрерывности самой функции ψ и ее производной $\frac{\partial\psi}{\partial z}$. Мы имеем таким образом:

$$A + B = C$$

$$k(A - B) = Ck'.$$

Решая эти уравнения совместно, получаем:

$$B = A(k - k') / (k + k')$$

$$C = 2Ak / (k + k').$$

В отраженном пучке число частиц, проходящих в единицу времени через единицу площади поперечного сечения, равняется, таким образом:

$$AA^*v(k - k')^2 / (k + k')^2,$$

а соответствующее число частиц в прошедшем пучке:

$$AA^*v'(2k)^2 / (k + k')^2.$$

Принимая во внимание соотношение: $\frac{k}{k'} = \frac{v}{v'}$, мы видим, что отраженная доля общего числа частиц определяется выражением

$$\frac{(v - v')^2}{(v + v')^2},$$

а прошедшая доля частиц — выражением

$$\frac{4vv'}{(v+v')^2}.$$

Сумма этих величин равняется единице, так что волновая функция приводит к закону сохранения материи (электронов). Этот закон представляет собой частный случай более общей закономерности, доказываемой ниже (в § 7).

§ 6. Решение волнового уравнения для электрона, движущегося в медленно меняющемся поле ¹⁾

Если потенциальная энергия $V(z)$ не меняется заметным образом на расстоянии порядка длины волны $\frac{h}{\sqrt{2m(W-V)}}$, то приближенное решение волнового уравнения может быть получено следующим образом. Положим:

$$\frac{8\pi^2m}{h^2}(W-V) = f(z)$$

и будем считать, что в рассматриваемом интервале z $f(z)$ положительно. Уравнение Шредингера приобретает при этом следующий вид:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + f(z)\psi = 0. \quad (13)$$

Полагая

$$\psi = Ae^{i\beta} \quad (14)$$

и подставляя эту функцию в уравнение (13), получаем

$$A'' + 2iA'\beta' + i\beta''A - \beta'^2A + fA = 0, \quad (15)$$

где штрихи означают дифференцирование по z . Положим

$$\beta'^2 = f(z).$$

В таком случае

$$\beta = \int [f(z)]^{\frac{1}{2}} dz.$$

Так как в интервале z , большом по сравнению с длиной волны, функция f почти не меняется, значение β в таком интервале можно выразить формулой

$$\beta \approx f^{\frac{1}{2}} z + \text{const.}$$

Из формулы (14) следует, что A в такой области в первом приближении может считаться постоянным и, следовательно:

$$A'' \ll A'f^{\frac{1}{2}} \ll Af.$$

¹⁾ Этот метод разработал *Jeffreys*, Proc. Lond. Math. Soc., 23, ч. 6.

В уравнении (15) можно пренебречь поэтому величиной A'' по сравнению с $A'\beta'$ (величиной $A'\beta'$ по сравнению с $A\beta''$ пренебречь нельзя, так как β'' само по себе мало). Мы получаем в результате:

$$2A'\beta' + \beta''A = 0,$$

и, следовательно:

$$A = \text{const} [f(z)]^{-\frac{1}{4}}.$$

Наше приближенное решение имеет, таким образом, следующий вид:

$$\psi = [f(z)]^{-\frac{1}{4}} \exp \left\{ \pm i \int [f(z)]^{\frac{1}{2}} dz \right\}. \quad (16)$$

Число электронов N , проходящих в единицу времени через единицу площади, равняется произведению $|\psi|^2$ на скорость электронов. Согласно (16) имеем:

$$|\psi|^2 = [f(z)]^{-\frac{1}{2}},$$

а скорость электронов равняется $[2(W-V)/m]^{\frac{1}{2}}$, т. е. пропорциональна $[f(z)]^{\frac{1}{2}}$. Величина N одинакова, таким образом, для всех z , как это и следовало ожидать.

Можно показать подобным же образом, что при отрицательном $f(z)$, т. е. при

$$g(z) = -f(z) = \frac{8\pi^2m}{h^2}(V-W),$$

приближенное решение волнового уравнения (13) имеет вид:

$$[g(z)]^{-\frac{1}{4}} \exp \left\{ \pm \int [g(z)]^{\frac{1}{2}} dz \right\}.$$

Во многих задачах функция $f(z)$ имеет корень z_0 , причем:

$$f(z) > 0 \quad (z > z_0)$$

$$f(z) < 0 \quad (z < z_0).$$

Нас интересует обычно частное решение, убывающее при $z < z_0$. Джеффрис (*Jeffreys*) показал, что если $f'(z_0) \neq 0$, то в области $z > z_0$ это решение будет:

$$\psi = f^{-\frac{1}{4}} \sin \left\{ \frac{\pi}{4} + \int_{z_0}^z [f(z)]^{\frac{1}{2}} dz \right\}. \quad (17)$$

§ 7. Формулы для тока; сохранение заряда

Мы постулировали выше, что величина $\psi\psi^*$ равняется числу электронов в единице объема в электронном пучке, описываемом волновой функцией ψ , или, точнее, что $\psi\psi^*dt$ равняется вероятности нахождения электрона в элементе объема dt . Аналогичные формулы могут быть полу-

чен и для тока, т. е. числа электронов, проходящих в единицу времени через данную поверхность. Точнее — нас интересует определение во всех точках пространства вектора \vec{j} , причем $(\vec{j} \cdot \vec{dS}) dt$ определяет вероятность того, что за время dt через элемент поверхности \vec{dS} пройдет один электрон. Искомая формула для \vec{j} имеет следующий вид:

$$\vec{j} = \frac{h}{4\pi im} (\psi^* \text{grad } \psi - \psi \text{grad } \psi^*). \quad (18)$$

Покажем, что эта формула правильно определяет вектор \vec{j} во всех тех случаях, когда он может быть измерен экспериментально.

В той области, где V постоянно или же равно нулю и где имеется лишь поток электронов, движущихся в направлении \vec{n} , волновая функция будет иметь следующий вид:

$$\psi = a \exp \{ 2\pi i m v \vec{n} \cdot \vec{r} / h \},$$

а \vec{j} равняется $v |a|^2 \vec{n}$, как это следует из уравнения (18).

В общем случае, для измерения \vec{j} на пути электронов следовало бы поместить коллектор и измерить заряд, попадающий на него в единицу времени. В результате подобного опыта мы измерили бы среднее значение \vec{j} для области, большой по сравнению с длиной волны; это значение представляет собой единственную величину, могущую быть определенной непосредственно. Если мы предположим, что V и вательно λ в этой области постоянны, то волновая функция будет иметь следующий вид:

$$\psi = \sum_s a_s \exp \{ 2\pi i m v_s \vec{n}_s \cdot \vec{r} / h \},$$

где \vec{n}_s — единичные векторы, a_s — постоянные. Эта волновая функция характеризует суперпозицию нескольких электронных пучков. То обстоятельство, что, согласно волновой механике, подобные пучки должны интерферировать, не оказывает влияния на число электронов, падающих на коллектор, поскольку размеры коллектора велики по сравнению с длиной волны. Если поверхность коллектора равняется A , и если она перпендикулярна к направлению \vec{n} , то число падающих на нее в единицу времени электронов равняется:

$$A \sum_s |a_s|^2 \vec{n} \cdot \vec{n}_s. \quad (19)$$

Согласно формуле (18), оно должно определяться интегралом

$$\int \vec{j} \cdot \vec{n} dS,$$

взятым по поверхности A . Это приводит, как легко видеть, к выражению (19), так как члены вида

$$a_s a_t^* \exp \{ 2\pi i m v (\vec{n}_s - \vec{n}_t) \cdot \vec{r} / h \}$$

при усреднении по поверхности, большой по сравнению с длиной волны, обращаются в нуль.

Если пучки приходят из различных источников, a_s должно быть взято в виде $a_s \exp(i\varphi_s)$, где φ_s — произвольная фаза, не имеющая никакого отношения к соответствующей фазе φ_t . Для получения тока мы должны усреднить выражение (18) по всем φ_s и φ_t ; при этом члены, содержащие произведения различных функций, обратятся в нуль.

Мы будем трактовать вектор \vec{j} как вектор тока, хотя непосредственно наблюдается может быть лишь усредненное значение \vec{j} .

С помощью волнового уравнения легко показать, что заряд сохраняется, т. е. что среднее число электронов, приходящих в данный объем, в случае стационарного пучка равняется числу электронов, выходящих из этого объема. Для доказательства этого положения нужно показать, что $\text{div } \vec{j}$ обращается в нуль. Из уравнения (18) следует, что

$$\text{div } \vec{j} = \frac{h}{4\pi im} \{ \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \}.$$

Так как функции ψ и ψ^* удовлетворяют уравнению Шредингера, мы получаем

$$\psi^* \nabla^2 \psi = -\psi^* \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W - V) \psi.$$

Величина $\psi \nabla^2 \psi^*$ определяется точно таким же выражением. Отсюда следует, что $\text{div } \vec{j} = 0$.

§ 8. Задачи, в которых $|\psi|^2$ меняется во времени

Рассмотрим хорошо откачанную разрядную трубку, в которой пучок электронов попадает на экран, снабженный отверстием с заслонкой. Предположим, что это отверстие внезапно открывается; тогда по истечении короткого промежутка времени t мы получим пучок электронов, прошедших через отверстие, простирающийся на расстояние vt от него. Здесь v — скорость электронов; с энергией W , обусловленной наличием ускоряющего поля, она связана следующим соотношением:

$$W = \frac{1}{2} m v^2.$$

С точки зрения классической механики этот результат тривиален. Однако, согласно нашим основным представлениям, мы должны были бы получить этот результат, постулируя наличие волны и предполагая

что $|\psi|^2$ равняется числу электронов в единице объема. С волновой точки зрения мы имели бы стационарный ряд волн, падавших на экран до того момента, пока отверстие не открылось, после чего пучок электронных лучей прошел через отверстие; скорость перемещения фронта пучка представляет собой групповую скорость соответствующих волн.

Групповая скорость любого волнового движения определяется как $\frac{d\nu}{dN}$, где ν — частота, а N — волновое число, равное $\frac{1}{\lambda}$, где λ — длина волны. Для того, чтобы волновое описание не противоречило опытным фактам (в данном случае — классической теории) эта скорость должна равняться классической скорости электронов v . Мы имеем таким образом

$$\frac{d\nu}{dN} = v.$$

Выражая v через N , получаем:

$$\frac{d\nu}{dN} = \frac{hN}{m}.$$

Принтегрировав это уравнение, находим:

$$\nu = \frac{1}{2} hN^2/m + \text{const} = \frac{W}{h} + \text{const}.$$

Соотношение

$$h\nu = E,$$

где E — релятивистское значение энергии частицы (содержащее покоящуюся массу):

$$E = mc^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}},$$

было получено де-Броглем¹⁾ на основании соображений, связанных с принципом относительности. Если $\frac{v}{c}$ мало по сравнению с единицей, это соотношение сводится к

$$h\nu = mc^2 + \frac{1}{2} mv^2.$$

Отсюда может быть определено значение константы mc^2 . Последняя, однако, не должна влиять на результаты эксперимента; в нерелятивистских задачах удобно положить ее равной нулю.

Волновое уравнение в общем случае немонотонического волнового процесса имеет вид:

$$\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 \psi - V\psi. \quad (20)$$

¹⁾ de Broglie, Ann. d. Physique, 10, 22, 1925.

Оно может быть получено наиболее просто следующим образом: волновая функция, описывающая поток электронов, обладающих энергией W , удовлетворяет уравнению

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W - V) \psi = 0. \quad (21)$$

Это волновая функция имеет следующий вид:

$$\psi = f(x, y, z) \exp(-2\pi i W t / h). \quad (22)$$

Искомое нами уравнение не должно содержать W ; с помощью выражения (22) получаем:

$$W\psi = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Из уравнения (21) следует, таким образом, что уравнение (20) удовлетворяется волновыми функциями, описывающими поток электронов, обладающих одной и той же энергией, т. е. волновыми функциями типа (22). Наиболее общий вид волновой функции мы получим путем суперпозиции таких волновых функций; эта наиболее общая волновая функция будет, таким образом, удовлетворять уравнению (20).

С помощью волнового уравнения (20) легко может быть получен закон сохранения заряда. Если мы обозначим $\psi\psi^*$ через ρ , то интеграл $\int \rho d\tau$, взятый по какому-нибудь объему, будет равняться вероятности нахождения электрона в этом объеме. Величина $\int \vec{j} \cdot \vec{dS}$ будет равняться вероятности выхода электрона из этого объема за единицу времени. Мы должны иметь, таким образом,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho d\tau + \int \vec{j} \cdot \vec{dS} = 0. \quad (23)$$

Это означает однако, что

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0. \quad (24)$$

Соотношение (24) легко может быть доказано с помощью волнового уравнения (20) и определения вектора тока \vec{j} (18); (см. Зоммерфельд, Волновая механика, стр. 97).

§ 9. Волновые пакеты

Предположим, что пучок электронов падает на экран, в котором имеется отверстие, первоначально закрытое какой-либо заслонкой, открывающееся затем на короткий промежуток времени и закрывающееся снова. В результате такого опыта облако электронов проходит через отверстие и перемещается в пространстве. Можно было бы

сказать, что область, в которой плотность электронов отлична от нуля, перемещается в пространстве. Размеры области должны быть тем меньше, чем меньшее время было открыто отверстие.

Для описания этого явления на языке волновой механики, мы должны ввести в рассмотрение пакет де-Броглевских волн, падающих на экран, а также „волновой пакет“ или „волновую группу“, проходящую через отверстие. Квадрат амплитуды волновой функции определяет, как обычно, вероятное значение плотности электронов. Волновая группа будет перемещаться с групповой скоростью де-Броглевских волн; последняя, как мы видели, равняется классической скорости соответствующих электронов. Волновая механика приводит, таким образом, к тем же результатам, что и механика классическая.

Если $\psi(x, y, z, t)$ — волновая функция в некоторой точке волнового пакета, то число n , определяемое¹⁾ интегралом (взятым по всему пространству)

$$n = \int \int \int |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz,$$

представляет собой вероятное число электронов, прошедших через отверстие. Если первоначально электронный пучок был достаточно слабым, или если отверстие было открыто в течение очень короткого промежутка времени, это число будет порядка единицы. Следует, конечно, отметить, что если бы n действительно равнялось единице, то это не означало бы, что в единицу времени действительно проходит только один электрон. Отсюда следовало бы лишь, что если бы этот опыт был повторен очень большое число раз p , то полное число электронов, прошедших через отверстие, равнялось бы pn , независимо от того, равнялось ли n в отдельных опытах нулю, единице, двум и т. д.

При рассмотрении волновых пакетов волновую функцию обычно нормируют таким образом, чтобы n равнялось единице.

Изучение волновых пакетов не может дать нам сведений о результатах действительных экспериментов; практически во всех опытах приходится иметь дело с непрерывным потоком свободных электронов. Волновые пакеты, в силу своего довольно поверхностного сходства с *частицами* классической теории, дают нам, однако, возможность понять основные идеи волновой механики. Так например, если можно показать, что волновой пакет будет двигаться по траектории классической частицы, то можно утверждать, что в данной задаче волновая и классическая механика приведут к одним и тем же результатам.

§ 9. 1. Одномерное движение волнового пакета в однородной среде. Для любого волнового движения можно установить некоторое соотношение между частотой ν и волновым числом N . Для де-Броглевских волн в нерелятивистской теории это соотношение имеет вид:

$$\dot{\nu} = \frac{1}{2} h N^2 / m.$$

¹⁾ n от времени не зависит (см. § 8).

В этом параграфе мы будем предполагать наличие более общего отношения

$$\nu = \nu(N).$$

Наиболее общий волновой процесс может быть представлен интегралом

$$\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} a(N) dN \exp[2\pi i(Nz - \nu t)],$$

где $a(N)$ — произвольная комплексная функция. Этот волновой процесс получается путем суперпозиции бесконечного числа плоских волн с произвольными амплитудами и фазами. Функция $a(N)$ может быть выбрана таким образом, чтобы в момент времени $t = 0$ функция ψ имела любой заданный вид. Положим, что в момент $t = 0$ волновой процесс сводится к „пакету“:

$$\psi = C \exp\left(2\pi i N_0 z - \frac{z^2}{\sigma^2}\right). \quad (25)$$

Для амплитуды колебаний выбрана функция Гаусса, так как в этом случае последующее интегрирование может быть осуществлено с помощью известных функций. В начальный момент времени волновой пакет находился, таким образом, вблизи начала координат, при чем обладал волновым числом N_0 и шириной порядка 2σ . Легко видеть (в дальнейшем это будет доказано), что

$$a(N) = C\pi^{\frac{1}{2}} \sigma \exp[-(N - N_0)^2 \pi^2 \sigma^2]. \quad (26)$$

Для определения формы волнового пакета в любой последующий момент времени мы должны вычислить интеграл

$$\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} C\pi^{\frac{1}{2}} \sigma \exp[2\pi i(Nz - \nu t) - (N - N_0)^2 \pi^2 \sigma^2] dN. \quad (27)$$

Разложим частоту ν в ряд Тейлора

$$\nu = \nu_0 + (N - N_0) \nu_0' + \frac{1}{2} (N - N_0)^2 \nu_0'' + \dots,$$

где ν_0, ν_0' и т. д. — значения ν и ее производных по N при $N = N_0$. Если $\sigma \gg \lambda$, то интеграл (27) зависит в основном от значений N близких к N_0 ; мы можем поэтому пренебречь членами $(N - N_0)^3$ в разложении ν . Отметим, что в релятивистской теории для де-Броглевских волн такое приближение является точным, так как ν представляет собой квадратичную функцию от N .

Полагая

$$N - N_0 = \xi,$$

получаем

$$\psi = C\pi^{\frac{1}{2}} \sigma \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-a\xi^2 + 2b\xi + c] d\xi,$$

где

$$\begin{aligned} a &= \pi^2 \sigma^2 + \pi i v_0'' t, \\ b &= -\pi i (v_0' t - z), \\ c &= 2\pi i (N_0 z - v_0'). \end{aligned}$$

Подинтегральная функция может быть представлена в следующем виде:

$$\exp \left[-a \left(\xi - \frac{b}{a} \right)^2 + c + \frac{b^2}{a} \right].$$

Полагая $\xi - \frac{b}{a} = \eta$, имеем

$$\psi = C \pi^{\frac{1}{2}} \sigma \exp \left(c + \frac{b^2}{a} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a \eta^2} d\eta = C \pi \sigma a^{-\frac{1}{2}} \exp \left(c + \frac{b^2}{a} \right).$$

Подставляя значения a, b, c , получаем

$$\psi = C \left[1 + \frac{i v_0'' t}{\pi \sigma^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[2\pi i (N_0 z - v_0' t) - \frac{(v_0' t - z)^2}{\sigma^2 + i v_0'' t / \pi} \right].$$

В момент времени $t=0$ волновой пакет сводится к форме (25), как это и следовало ожидать. В момент времени t центр волнового пакета находится в точке

$$z = v_0' t.$$

Скорость волнового пакета равняется, таким образом, групповой скорости $\frac{dv}{dN}$. Весьма существенным свойством волнового пакета является его способность расплываться. Рассматривая только экспоненциальные члены функции ψ , мы получаем для амплитуды $|\psi|$ следующее выражение:

$$\exp \left[\frac{-\sigma^2 (v_0' t - z)^2}{\sigma^4 + (v_0'' t / \pi)^2} \right].$$

При больших значениях t ширина волнового пакета будет, таким образом, порядка

$$2v_0'' t / \pi \sigma.$$

С течением времени волновой пакет расплывается, причем скорость увеличения его ширины равна:

$$\frac{d^2 v}{dN^2} \frac{2}{\pi \sigma}.$$

Для де-Броглевских волн в нерелятивистской теории получаем¹⁾

$$\frac{dv}{dN} = \frac{hN}{m} = v \quad \text{и} \quad \frac{d^2 v}{dN^2} = \frac{h}{m}.$$

Волновая функция ψ имеет при этом следующий вид:

$$\psi = C \left[1 + \frac{iht}{\pi m \sigma^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{-(vt - z)^2}{\sigma^2 + iht / \pi m} - 2\pi i \left(\frac{mv^2 t}{2h} - \frac{mvz}{h} \right) \right].$$

Одно из наиболее существенных свойств волнового пакета состоит в том, что при прохождении его через электрическое или магнитное поле, не меняющееся заметным образом на расстоянии порядка его размеров, он движется по классической траектории. Доказательство этого положения приводится в различных учебниках²⁾.

¹⁾ Волновые пакеты для случая де-Броглевских волн были рассмотрены различными авторами. *Дарвин* (*Darwin*, Proc. Roy. Soc. A, 117, 258, 1927) определил волновую функцию для трехмерного волнового пакета в свободном пространстве (ур-ние (5.6)), а также для волнового пакета, описывающего электрон, находящийся под воздействием постоянной электрической силы (ур-ние (6.2)) или же под воздействием постоянного магнитного поля (ур-ние (7.10)). Волновые пакеты рассмотрены также в книге *Френкеля*, Волновая механика, §§ 7 и 9 и у *Condon and Morse*, Quantum Mechanics, стр. 219.

²⁾ См. например: *Дирак*. Принципы квантовой механики, *Френкель*, Волновая механика, ч. I. *Debye*, Phys. ZS. 28, 170, 1927; *Ehrenfest*, ZS. f. Physik 45, 455, 1927; *Ruark*, Phys. Rev. 32, 1133, 1928).

ГЛАВА II

ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ ПУЧКА ЧАСТИЦ СИЛОВЫМ ЦЕНТРОМ

§ 1. Вычисление интенсивности рассеянных лучей

Задача о столкновении электрона с атомом относится к задаче „многих тел“. В этой главе мы рассмотрим вопрос о рассеянии потока заряженных частиц небольшой сферически-симметричной областью, в которой их потенциальная энергия отлична от нуля; эту область мы будем называть „атомом“, а потенциальную энергию частицы на расстоянии r от ядра мы будем обозначать через $V(r)$. В главе VIII показано, что упругое рассеяние электронов атомами в известном приближении действительно можно трактовать подобным образом, а также приведены методы вычисления $V(r)$.

В опытах по изучению рассеяния пучка частиц измеряют обычно число рассеянных частиц, падающих в единицу времени на элемент поверхности dS , находящийся на расстоянии r от рассеивающих атомов. Для удобства вычислений предположим, что имеется только один рассеивающий атом. Число частиц, падающих на поверхность dS , будет прямо пропорционально площади dS и обратно пропорционально квадрату расстояния r . Это значит, что число падающих частиц пропорционально телесному углу $d\omega$, под которым площадь dS видна из центра атома. Частицы, падающие на dS , мы будем называть частицами „рассеянными на угол θ внутри телесного угла $d\omega$ “.

Число частиц, рассеянных внутри телесного угла $d\omega$, пропорционально также току, приходящемуся на единицу поперечного сечения падающего пучка. Предположим, что в падающем пучке за единицу времени через единицу поперечного сечения проходит N частиц. Положим, что число частиц, рассеянных в единицу времени на угол θ внутри телесного угла $d\omega$, равняется

$$NI(\theta) d\omega.$$

Мы должны, таким образом, вычислить $I(\theta)$. Величина $I(\theta) d\omega$ имеет размерность поверхности; мы будем называть ее „эффективным сечением атома для рассеяния внутри телесного угла $d\omega$ “.

В качестве заряженных частиц мы будем рассматривать в дальнейшем электроны, хотя излагаемые здесь соображения справедливы в одинаковой степени для частиц любого рода.

Обозначим через (x, y, z) декартовы координаты электрона в некоторый момент времени, через (r, θ, φ) — его сферические координаты,

причем ось z является осью отсчета угла θ ¹⁾. Предположим, что атом расположен в начале координат, а потенциальная энергия электрона, находящегося на расстоянии r от начала координат, равняется $V(r)$. В этой главе мы примем, что $V(r)$ стремится к нулю быстрее, нежели $\frac{1}{r}$; случай рассеяния Кулоновым полем будет рассмотрен в главе III. Предположим, что поток электронов движется слева направо вдоль оси z со скоростью v . Будем описывать этот поток электронов плоской волной $\exp(ikz)$, где k равняется $2\pi mv/h$. Волна эта соответствует плотности в один электрон на единицу объема и, следовательно, потоку v электронов в единицу времени через единицу поперечного сечения.

Волна будет рассеиваться атомом; амплитуда рассеянной волны в точке (r, θ, φ) может быть представлена в виде

$$r^{-1} f(\theta) e^{ikr}.$$

Наша задача сводится к нахождению функции $f(\theta)$. Зная ее, мы сможем определить число электронов, рассеянных в единицу времени внутри данного телесного угла. Число электронов в рассеянной волне, проходящих через элемент поверхности dS в точке (r, θ, φ) , равняется $vr^{-2} dS |f(\theta)|^2$ за единицу времени; если в падающем пучке в единицу времени через единицу поперечного сечения проходит один электрон, то число электронов $I(\theta) d\omega$, рассеянных в единицу времени внутри данного телесного угла $d\omega$, равняется $|f(\theta)|^2 d\omega$. Мы получаем, таким образом,

$$I(\theta) = |f(\theta)|^2.$$

Число частиц, рассеянных на углы в интервале между θ и $\theta + d\theta$, равняется

$$|f(\theta)|^2 2\pi \sin \theta d\theta.$$

Наша задача заключается, таким образом, в нахождении такого решения ψ волнового уравнения, которое на больших расстояниях от атома характеризовало бы падающую и рассеянную волны. При больших r мы должны иметь

$$\psi \sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} f(\theta). \tag{1}$$

Волновое уравнение, которому удовлетворяет функция ψ (уравнение Шредингера), может быть представлено в следующем виде:

$$\nabla^2 \psi + [k^2 - U(r)] \psi = 0, \tag{2}$$

где

$$k = 2\pi mv/h, \quad U(r) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} V(r).$$

Плоская волна e^{ikz} является решением уравнения

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0. \tag{3}$$

¹⁾ $r \cos \theta = z$, $r \sin \theta e^{i\varphi} = x + iy$.

Это уравнение может быть решено также в сферических координатах; легко видеть, что функция

$$\psi = P_n(\cos \theta) f_n(r)$$

является его решением, если f_n — решение уравнения:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df}{dr} \right) + \left(k^2 - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) f = 0, \quad (4)$$

а $P_n(\cos \theta)$ представляет собой n -ый полином Лежандра¹⁾. Ур-ние (4) может быть решено путем разложения в ряд; имеются два решения, одно из них начинается с члена r^n , другое — с члена r^{-n-1} ; оба они могут быть выражены через Бесселевы функции (см. ур-ние (9)). Обозначим через $f_n(r)$ решение уравнения (4), конечное при $r=0$. Функция $f_n(r)$ определена, таким образом, с точностью до произвольного постоянного коэффициента.

Если A_n — произвольные постоянные, то выражение

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n P_n(\cos \theta) f_n(r) \quad (5)$$

является решением ур-ния (3); мы знаем далее, что оно является наиболее общим решением ур-ния (3), обладающим осевой симметрией (т. е. не содержащим φ) и конечным в начале координат. Отсюда следует, что функция e^{ikz} может быть представлена в следующем виде:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{n=0}^{\infty} A_n P_n(\cos \theta) f_n(r).$$

Для нахождения A_n умножим обе части этого равенства на $P_n(\cos \theta) \sin \theta$ и проинтегрируем его от 0 до π . Полагая $\cos \theta = t$, получаем

$$\frac{2}{2n+1} A_n f_n(r) = \int_{-1}^{+1} e^{ikrt} P_n(t) dt, \quad (6)$$

где f_n определено с точностью до произвольного постоянного коэффициента, от которого зависит и коэффициент A_n . Мы можем определить функцию f_n точно с помощью ее асимптотического разложения для больших r ; интегрируя правую часть равенства (6) по частям, получаем:

$$\frac{1}{ikr} [e^{ikrt} P_n(t)]_{t=-1}^{t=+1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^{+1} e^{ikrt} P_n'(t) dt.$$

Второй член этого выражения — порядка $\frac{1}{r^2}$; при больших r имеем таким образом:

$$\frac{2}{2n+1} A_n f_n(r) \sim \frac{1}{ikr} [e^{ikrt} P_n(t)]_{-1}^{+1}.$$

¹⁾ Уиттекер и Ватсон. Курс современного анализа, ч. II, стр. 91, ГТТИ, 1934.

Так как $P_n(1) = 1$, а $P_n(-1) = (-1)^n$, то правая часть этого выражения равняется

$$2i^n (kr)^{-1} \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right).$$

Определим теперь функцию f_n из того условия, чтобы она была решением уравнения (4), имеющим асимптотическую форму

$$f_n(r) \sim (kr)^{-1} \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right). \quad (7)$$

В таком случае A_n равняется $(2n+1)i^n$ и, следовательно,

$$e^{ikz} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)i^n P_n(\cos \theta) f_n(r) \quad (8)$$

представляет собой искомое разложение. Приведем также выражения функций f_n через Бесселевы функции

$$f_0(r) = \frac{\sin kr}{kr}$$

$$f_n(r) = (\pi/2kr)^{\frac{1}{2}} I_{n+\frac{1}{2}}(kr). \quad (9)$$

Рассмотрим теперь волновое ур-ние (2) для электрона, движущегося в поле атома. Как и раньше, общее решение ур-ния (2), обладающее осевой симметрией, имеет вид

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} A_n P_n(\cos \theta) L_n(r), \quad (10)$$

где A_n — произвольные постоянные, а L_n — любое решение уравнения

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dL}{dr} \right) + \left(k^2 - U(r) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) L = 0. \quad (11)$$

Как и выше, ур-ние (11) имеет два независимых решения¹⁾, одно — конечное в начале координат, а другое — бесконечное. Мы выберем постоянные A_n таким образом, чтобы функция (10) характеризовала падающую и рассеянную волны, т. е. так, чтобы функция (10) имела асимптотический вид (1). Наша волновая функция должна быть конечной во всем пространстве; функции L_n должны поэтому быть решениями ур-ния (11), конечными в начале координат. Они определены этим условием с точностью до произвольного постоянного коэффициента.

Если мы положим

$$L_n(r) = r^{-1} G(r),$$

¹⁾ Мы предполагаем, что $U(r)$ может обладать в начале координат полюсом, порядок которого не выше r^{-1} . (См. § 3).

то уравнение (11) примет следующий вид:

$$\frac{d^2 G}{dr^2} + \left[k^2 - U(r) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] G = 0. \quad (12)$$

При больших r последние два члена стремятся к нулю; можно было бы поэтому ожидать, что асимптотический вид любого решения G :

$$G \sim A \sin(kr + \varepsilon). \quad (13)$$

где A и ε — постоянные.

Для того, чтобы выяснить имеет ли это место в действительности, положим

$$G = u(r) e^{ikr}.$$

Подставляя это выражение в уравнение (12), получаем

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + 2ik \frac{du}{dr} - \left[U + \frac{n(n+1)}{r^2} \right] u = 0. \quad (14)$$

Так как при больших r u почти постоянно, мы можем положить

$$\frac{d^2 u}{dr^2} \ll k \frac{du}{dr}.$$

Пренебрегая первым членом уравнения (14) и интегрируя, получаем

$$2ik \lg u = \int \left[U(r) + \frac{n(n+1)}{r^2} \right] dr.$$

При больших r правая часть этого равенства стремится к постоянному пределу только в том случае, если в бесконечности $U(r)$ стремится к нулю быстрее, нежели $\frac{1}{r}$. Для полей, убывающих быстрее, нежели

кулоново поле, функция G имеет, таким образом, асимптотическую форму (13). Случай кулонова поля будет рассмотрен в главе III.

Частное решение уравнения (11), конечное в начале координат, будет, таким образом, иметь следующую асимптотическую форму:

$$Cr^{-1} \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} + \eta_n \right),$$

где C — произвольная постоянная, а η_n — постоянная¹⁾, зависящая от k и от $U(r)$; в общем случае она может быть определена путем численного интегрирования (см. § 3). Для нахождения произвольной постоянной C мы определим конечное решение уравнения (11) $L_n(r)$ таким образом, чтобы оно имело асимптотическую форму:

$$(kr)^{-1} \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} + \eta_n \right). \quad (15)$$

¹⁾ Член $-\frac{1}{2} n\pi$ прибавляется для того, чтобы при $U(r) = 0$ η_n обращалось в нуль.

Мы должны теперь определить постоянные A_n в выражении (10). Вычтя из него выражение (8) для падающей плоской волны, мы получим выражение для рассеянной волны. Мы должны выбрать коэффициенты A_n таким образом, чтобы последнее действительно характеризовало рассеянную волну, т. е. так, чтобы асимптотическое разложение не содержало членов типа $r^{-1} e^{-ikr}$ (соответствующих сходящейся волне). При больших r мы должны, таким образом, иметь для любых n :

$$A_n L_n(r) - (2n+1) i^n f_n(r) \sim C_n r_{11}^{-1} e^{ikr},$$

где C_n — некоторая постоянная. Подставляя асимптотические значения L_n и f_n получаем в левой части равенства

$$\frac{e^{ikr}}{2ikr} [A_n e^{i\eta_n} - (2n+1) i^n] - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} [A_n e^{-i\eta_n} - (2n+1) i^n],$$

где

$$kr = kr - \frac{1}{2} n\pi.$$

Выбирая A_n таким образом, чтобы второй член обращался в нуль, находим:

$$A_n = (2n+1) i^n e^{i\eta_n}.$$

Для волновой функции, характеризующей падающую и рассеянную волны, мы имеем, таким образом,

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n e^{i\eta_n} L_n(r) P_n(\cos \theta). \quad (16)$$

Асимптотическая форма функции, описывающей рассеянную волну:

$$r^{-1} e^{ikr} f(\theta),$$

где

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) [e^{2i\eta_n} - 1] P_n(\cos \theta). \quad (17)$$

Это выражение определяет амплитуду рассеянной волны. Следует отметить, что функция $f(\theta)$ комплексна; интенсивность рассеяния $I(\theta)$ определяется квадратом ее модуля, т. е. величиной $A^2 + B^2$, где

$$A = \frac{1}{2k} \sum (2n+1) [\cos 2\eta_n - 1] P_n,$$

$$B = \frac{1}{2k} \sum (2n+1) \sin 2\eta_n P_n.$$

В общем случае эти ряды сходятся (см. § 2). Имеется только один случай, когда ряды (17) могут быть просуммированы с помощью известных функций — случай рассеяния кулоновым полем (подробнее см. главу III). Мы находим при этом, что интенсивность рассеяния имеет значение, даваемое классической теорией. Для каких-либо других полей последнее положение оказывается несправедливым.

Полное сечение Q атома для упругого столкновения с электронами данной скорости определяется как полное число электронов, упруго рассеянных атомом в единицу времени для падающего пучка с единичной интенсивностью (такого, в котором в единицу времени через единицу поперечного сечения проходит один электрон). Практически измеряется обычно число электронов, рассеянных на некоторый угол, превышающий малый угол θ_0 ; но так как для атомных полей $f(\theta)$ при $\theta=0$ конечно, Q весьма нечувствительно к изменениям θ_0 , и последнее может быть поэтому положено равным нулю¹⁾.

Q имеет, таким образом, следующий вид:

$$Q = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta.$$

или же:

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \sin^2 \eta_n. \quad (18)$$

Изложенный в этом параграфе метод впервые был применен Релеем²⁾. К задаче о рассеянии электронов атомами он был применен Факсенем и Хольстмарком³⁾.

§ 2. Соотношение между фазами η_n и угловым моментом рассеянной частицы

Входящие в выражение (17) фазы η_n определяются, как мы видели, следующим образом. Обозначим через $G_n(r)$ конечное решение уравнения

$$G'' + \left[k^2 - U(r) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] G = 0, \quad (19)$$

где штрихи означают дифференцирование по r . При больших r G будет иметь асимптотическую форму

$$G \sim \sin \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n \right).$$

Это выражение и определяет η_n .

Если при больших r $U(r)$ убывает экспоненциально до нуля, то можно определить значение η_n для достаточно больших n и определить тем самым число членов, необходимых для суммирования ряда (17), определяющего функцию $f(\theta)$. Таким способом может быть доказана также и сходимости этих рядов.

Обозначим

$$F(r) = k^2 - U(r) - \frac{n(n+1)}{r^2}. \quad (20)$$

Если $U(r)$ не имеет полюса более высокого порядка, нежели r^{-1} , то функция $F(r)$ при малых r отрицательна, а при больших r положительна, и обладает таким образом по крайней мере одним корнем. Для простоты предположим, что $F(r)$ имеет только один корень; обозначим его через r_n .

Решение ур-ния (19) при малых r будет вести себя как $A r^{n+1}$, где A постоянная; предположим, что она положительна. При малых r как G , так и G' положительны; из уравнения (19) следует, что G'' также положительно. При увеличении r функция G не может уменьшаться до тех пор, пока G' не изменит знака; последнее может иметь место лишь при значении r , превышающем первый корень функции G'' . Но так как функция G возрастает и следовательно положительна вплоть до первого корня функции G'' , то из уравнения (19) следует, что этот корень соответствует точке r_n . Функция G возрастает, таким образом, монотонно до точки $r = r_n$. Совершенно аналогичный результат имеет место и для случая отрицательного A .

При $r > r_n$ функция G носит колебательный характер, как это показано на рис. 2.

Найдем теперь наименьшее расстояние (по классической теории) для электрона с энергией E , от центра атома, если его угловой момент относительно этого центра, т. е. ядра, равняется I . I представляет собой произведение начального импульса электрона на „параметр столкновения“ p^1). Если v — скорость электрона в точке наибольшего сближения, то в силу принципа сохранения энергии имеем:

$$\frac{1}{2} mv^2 + V(r) = E,$$

а согласно принципу сохранения углового момента (в связи с тем, что радиальная скорость в точке наибольшего сближения равняется нулю):

$$mvr = I.$$

Исключая v , получаем следующее уравнение для r :

$$E - V(r) - I^2/2mr^2 = 0. \quad (21)$$

Если мы положим:

$$I = h [n(n+1)]^{1/2} / 2\pi, \quad (22)$$

то ур-ние (21) будет эквивалентно уравнению:

$$F(r) = 0,$$

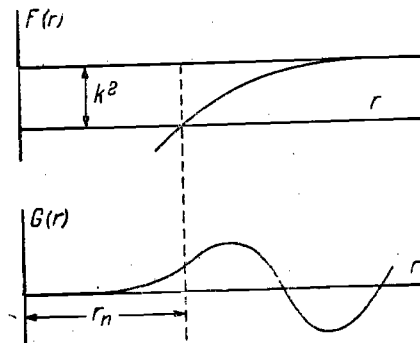


Рис. 2.

¹⁾ См. главу X, § 1.

²⁾ Rayleigh, Theory of Sound, стр. 323.

³⁾ Faxon and Holtsmark, Zs. f. Phys. 45, 307, 1927.

¹⁾ „Параметром столкновения“ называется расстояние между первоначальной линией движения частицы и центром рассеивающего поля.

где $F(r)$ определяется ур-нием (20). Корень r_n функции $F(r)$ представляет собой, таким образом, то расстояние, на которое приблизилась бы к центру атома частица с угловым моментом (22) согласно классической теории.

Мы уже видели, что при $r \ll r_n$ функция $|G_n(r)|$ очень мала. Покажем теперь, что если n столь велико, что частица с угловым моментом l , определяющимся выражением (22), не может проникнуть внутрь атома (согласно классической теории), то соответствующая фаза η_n очень мала. Мы должны показать, что если $V(r_n)$ очень мало для n , превышающего некоторое определенное значение, то η_n также очень мало для этих значений n . Отметим, что если $V(r_n)$ очень мало, то r_n приближенно может быть определено как корень выражения:

$$k^2 - n(n+1)/r^2.$$

Предположим теперь, что $g_n(r)$ — решение уравнения

$$\frac{d^2g}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) g = 0, \quad (23)$$

конечное в начале координат, причем произвольный постоянный коэффициент выбран таким образом, что при больших r

$$g_n \sim \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right).$$

Функция g_n равняется [см. ур-ние (9)]:

$$(\pi kr/2)^{\frac{1}{2}} J_{n+\frac{1}{2}}(kr).$$

Из приведенных выше соображений следует, что при $r < r_n$ по мере убывания r функция g_n убывает экспоненциально. По форме она сходна с функцией G , изображенной на рис. 2.

Решим теперь волновое ур-ние (19) с помощью метода возмущений. Положим

$$G_n = g_n + \Phi$$

и предположим, что произведением ΦU можно пренебречь. Подставляя это выражение в ур-ние (19), получаем следующее уравнение для определения Φ

$$\frac{d^2\Phi}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] \Phi = U(r) g_n(r). \quad (24)$$

Положим

$$\Phi = g_n^*(r) \zeta_n(r).$$

Подставляя это значение Φ в ур-ние (24), получаем

$$\zeta_n'' g_n + 2\zeta_n' g_n' = U(r) g_n(r).$$

Умножая это уравнение на $g(r)$ и интегрируя, имеем:

$$\zeta_n' g^2 = \int U(r) [g(r)]^2 dr.$$

При $r=0$ функция ζ' должна быть конечной, а $g(r)$ при малых r должно вести себя как r^{n+1} ; нижний предел интегрирования должен поэтому равняться нулю. Мы видим, таким образом, что

$$\frac{d\zeta}{dr} = [g(r)]^{-2} \int_0^r U(r) [g(r)]^2 dr.$$

При больших r мы имеем

$$\frac{d\zeta}{dr} \sim \operatorname{cosec}^2 \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right) \int_0^\infty U(r) [g(r)]^2 dr, \quad (25)$$

так как интеграл, стоящий в правой части, сходится.

Обозначим через A_n интеграл

$$\int_0^\infty U(r) [g_n(r)]^2 dr.$$

Мы предположили, что для рассматриваемого значения n функция $U(r)$ мала при $r > r_n$; мы знаем также, что, при $r < r_n$, g_n мало. Величина A_n должна быть, таким образом, малой.

Принтегрировав выражение (25), получаем

$$\zeta \sim - \left[\operatorname{ctg} \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right) + a \right] A_n/k,$$

где a — постоянная. Отсюда следует, что

$$G_n \sim \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right) - \left[\cos \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right) + a \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} \right) \right] A_n/k.$$

Пренебрегая членами, содержащими квадрат η_n , мы видим, что

$$G_n \sim \operatorname{const} \cdot \sin \left(kr - \frac{n\pi}{2} + \eta_n \right), \quad (26)$$

где

$$\eta_n = -A_n/k.$$

Мы получаем, таким образом, окончательно

$$\eta_n = -\frac{\pi}{2} \frac{8\pi^2 m}{h^2} \int_0^\infty V(r) [J_{n+\frac{1}{2}}(kr)]^2 r dr. \quad (27)$$

Эта формула справедлива, если правая часть ее мала; отсюда следует, что при рассматриваемых условиях η_n мало.

Формула (27) справедлива для больших n ; ею можно воспользоваться поэтому для исследования сходимости рядов (17), определяющих амплитуду рассеяния. Эти ряды являются сходящимися, если сходится выражение

$$\sum \eta_n P_n(\cos \theta) (2n+1).$$

Если $\eta_n \ll 1$ при любых n , то формулой (27) можно пользоваться для всех n . Амплитуда рассеяния равняется, таким образом,

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \eta_n P_n(\cos \theta). \quad (28)$$

Выполнив суммирование, мы получим хорошо известную формулу Борна (см. § 2 главы VII).

§ 3. Примеры рассеяния центральным полем

Примеры применения вышеизложенной теории к рассеянию электронов атомами приведены в главе X этой книги; в этом параграфе мы рассмотрим лишь некоторые простые примеры, иллюстрирующие развитые выше соображения.

§ 3.1. Рассеяние „потенциальной ямой“. Потенциал электрона в поле „атома“ мы определим следующим образом:

$$\begin{aligned} V(r) &= -D & (r < a) \\ &= 0 & (r > a). \end{aligned}$$

Предположим, что длина волны λ значительно больше a , так что всеми фазами η_n за исключением первой η_0 можно пренебречь. (Заметим, что расстояние наибольшего сближения для частицы, угловой момент которой равен одному кванту, равняется $\frac{\lambda}{2\pi}$, если частица не попадает в потенциальную яму). Волна, рассеянная атомом, описывается в таком случае функцией:

$$\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{1}{2ik} [e^{2i\eta_0} - 1]. \quad (29)$$

Для определения η_0 найдем асимптотическую форму решения уравнения

$$\frac{d^2G}{dr^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} (E - V) G = 0,$$

обращающуюся в нуль в начале координат (так как $r^{-1}G$ должно быть конечным). Это решение имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} A \sin k'r & & (k'^2 = 8\pi^2m(E+D)/h^2, r < a) \\ \sin(kr + \eta_0) & & (k^2 = 8\pi^2mE/h^2, r > a). \end{aligned}$$

Постоянные A и η_0 должны быть выбраны таким образом, чтобы G и $\frac{dG}{dr}$ при $r=a$ оставались непрерывными, т. е. таким образом, чтобы имели место уравнения:

$$\begin{aligned} A \sin k'a &= \sin(ka + \eta_0) \\ A k' \cos k'a &= k \cos(ka + \eta_0). \end{aligned}$$

Эти уравнения дают

$$\eta_0 = \text{tg}^{-1} \left(\frac{k'}{k} \text{tg} k'a \right) - ka. \quad (30)$$

На рис. 3 волновая функция G изображена сплошной линией; пунктирная кривая представляет собой функцию

$$G = \sin kr.$$

Фаза η_0 определяется расстояниями AB или $A'B'$, умноженными на k . Из чертежа следует, что в случае поля сил притяжения η_0 положительно; легко видеть, что для поля сил отталкивания η_0 отрицательно.

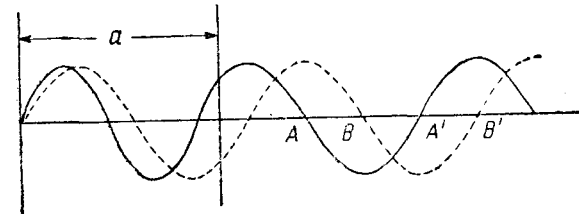


Рис. 3.

При убывании скорости электронов до нуля η_0 в общем случае также стремится к нулю, как это можно видеть из уравнения (30). Интенсивность рассеяния, определяющаяся квадратом функции (29), стремится, таким образом, к некоторому конечному пределу. Если

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\text{tg} k'a}{k'} = a,$$

то предел этот равняется нулю. Если же, с другой стороны,

$$\lim_{k \rightarrow 0} \text{tg} k'a = \infty,$$

то η_0 стремится к нулю не будет, и интенсивность рассеяния становится равной бесконечности. Эффективное сечение атома для очень медленных электронов может быть таким образом как много больше, так и много меньше той области, в которой $V(r)$ сравнимо с энергией электрона.

§ 3.2. Рассеяние малой непроницаемой сферой. Примем, как и прежде, что радиус a сферы значительно меньше, нежели $\lambda/2\pi$, так что можно ограничиться лишь рассмотрением первого члена разложения. На поверхности сферы волновая функция должна обращаться в нуль. Мы имеем поэтому

$$G = \sin k(r-a).$$

Отсюда следует, что

$$\eta_0 = -ak.$$

Эффективное сечение [см. уравнение (18)] равняется

$$4\pi k^{-2} \sin^2 \eta_0,$$

или, так как $\eta_0 \ll 1$, приближенно $4\pi a^2$. Эффективное сечение, вычисленное с помощью квантовой механики, превышает, таким образом, в четыре раза значение, получаемое по классической теории.

§ 3. 3. **Рассеяние полем, обратно пропорциональным кубу расстояния.** Предположим, что на расстоянии r от ядра потенциальная энергия равняется γr^{-2} . В таком случае волновое уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{d^2 L}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dL}{dr} + \left(k^2 - \frac{n(n+1) + \beta}{r^2} \right) L = 0; \quad (\beta = 8\pi^2 m \gamma / k^2). \quad (31)$$

Решения этого уравнения выражаются формулой

$$r^{-\frac{1}{2}} J_{\nu + \frac{1}{2}}(kr), \quad (32)$$

где ν — любой из двух корней уравнения

$$\nu(\nu + 1) = n(n + 1) + \beta, \quad (33)$$

т. е.

$$\nu = \frac{1}{2} [-1 \pm (1 + 4n + 4n^2 + 4\beta)^{\frac{1}{2}}].$$

Наша волновая функция $L(r)$ должна быть конечной в начале координат. Это означает (принимая во внимание, что в начале координат функция $r^{-\frac{1}{2}} J_{\nu + \frac{1}{2}}$ ведет себя как r^ν), что

$$\nu \geq 0 \quad (\text{для всех } n).$$

Если β положительно (отталкивание), то это условие выполняется для одного из корней и не выполняется для другого. Искомое нами конечное решение является, таким образом, единственным, как и для полей с особой точкой более низкого порядка.

Если β отрицательно (притяжение), имеются две возможности. Если $-\frac{1}{4} < \beta < 0$, то при $n = 0$ оба решения в начале координат не удовлетворяют условию конечности; однако, имеется одно решение с особой точкой более низкого порядка; воспользовавшись им, мы сможем получить формулу для интенсивности рассеяния. Если, с другой стороны, $\beta < -\frac{1}{4}$, оба решения будут вести себя вблизи начала координат как $r^{-\frac{1}{2}} \exp(\pm ia \lg r)$.

Рассматриваемая нами задача о рассеянии не имеет в этом случае решения, так как у нас нет критерия для выбора решения ур-ния (31); фаза η_0 не может быть поэтому определена.

Возвращаясь к случаю сил отталкивания, мы находим с помощью асимптотического выражения (32):

$$\tau_n = \frac{\pi}{2} (\nu - n),$$

где ν — положительный корень ур-ния (33). При больших n это выражение сводится к

$$\frac{1}{2} \pi \beta / (2n + 1).$$

Формула (27), как легко проверить, приводит к такому же результату.

Примечание редактора. Формула (18) для полного эффективного сечения может быть истолкована следующим наглядным образом. Если p есть „прицельное расстояние“ падающей частицы от неподвижного силового центра, то πp^2 представляет собой „площадь мишени“, образуемой последним, или „эффективное сечение“ его для отклонений, превышающих определенный угол θ , соответствующий p . Далее, прицельному расстоянию p соответствует момент количества движения частицы pmv (где v — ее начальная скорость). Рассмотрим квантованные значения этого момента $pmv = n \frac{h}{2\pi}$, где $n = 0, 1, 2, \dots$,

т. е. квантованные значения прицельного расстояния $p = p_n = \frac{n}{2\pi} \frac{h}{mv} = \frac{n\lambda}{2\pi} = \frac{n}{k}$ (при заданной начальной скорости v или длине волны λ). Промежутку между двумя последующими значениями углового квантового числа n и $n + 1$ соответствует площадь мишени $\pi(p_{n+1}^2 - p_n^2) = \frac{\pi}{k^2} (2n + 1)$. Таким образом, эффективное сечение (18) может быть представлено в виде

$$Q = 4 \sum_{n=0}^{\infty} \pi (p_{n+1}^2 - p_n^2) \sin^2 \tau_n.$$

Отсюда следует, что множитель $4 \sin^2 \tau_n$ может быть интегрирован как вероятность отклонения частицы при падении ее на „мишень“ т. е. на рассеивающий центр с моментом количества движения, заключенным между квантованными значениями $n \frac{h}{2\pi}$ и $(n + 1) \frac{h}{2\pi}$.

ГЛАВА III

РАСSEЯНИЕ ПУЧКА ЧАСТИЦ КУЛОНОВЫМ ПОЛЕМ

§ 1. Введение

Если пучок заряженных частиц, обладающих зарядами $Z'e$, в котором в единицу времени через единицу поперечного сечения проходит одна частица, падает на отдельное ядро с бесконечной массой и с зарядом $Z'e$, то, согласно механике Ньютона, число частиц $I(\theta) d\omega$, рассеянных за единицу времени на угол θ внутри телесного угла $d\omega$, определяется выражением

$$I(\theta) = (ZZ'\varepsilon^2/2mv^2)^2 \operatorname{cosec}^4 \frac{\theta}{2}, \quad (1)$$

где m и v — масса и скорость падающих частиц. Впервые эта формула была получена Резерфордом; доказательство ее приводится в различных учебниках, и мы не будем здесь на нем останавливаться¹⁾. Эта формула находится в согласии с экспериментальными данными о рассеянии альфа-частиц тяжелыми ядрами.

В этой главе мы покажем, что она может быть получена также и на основании соображений волновой механики. Мы рассмотрим вопрос о рассеянии потока заряженных частиц (электронов или α -частиц) тяжелым ядром, причем предположим, что сила взаимодействия частицы и ядра обратно пропорциональна квадрату расстояния между ними. В таком случае:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (\text{для электронов})$$

$$V(r) = \frac{2Ze^2}{r} \quad (\text{для альфа-частиц}),$$

где Z — атомный номер рассеивающего ядра.

Возьмем в общем виде

$$V(r) = \frac{ZZ'\varepsilon^2}{r}, \quad (2)$$

где $Z'\varepsilon$ — заряд рассеивающей частицы, так что Z' положительно или отрицательно, в зависимости от того, заряжена ли рассеивающая частица положительно или отрицательно. Волновое уравнение имеет в таком случае следующий вид:

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E - \frac{ZZ'\varepsilon^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (3)$$

Покажем, что решение этого уравнения может быть получено в асимптотической форме:

$$\psi \sim I + Sf(\theta), \quad (4)$$

где I характеризует падающую волну, S — рассеянную волну и

$$|f(\theta)| = (ZZ'\varepsilon^2/2mv^2) \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2}. \quad (5)$$

В главе II мы отмечали, что приведенный нами метод вычисления амплитуды рассеянной волны применим лишь в том случае, когда при возрастании r до бесконечности $V(r)$ стремится к нулю быстрее, нежели r^{-1} . Это ограничение связано с тем обстоятельством, что решение уравнения

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dL}{dr} \right) + \left[\frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E - \frac{ZZ'\varepsilon^2}{r} \right) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] L = 0 \quad (6)$$

имеет асимптотический вид¹⁾:

$$(kr)^{-1} \sin \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n - \alpha \lg 2kr \right) \quad (\alpha = 2\pi ZZ'\varepsilon^2/hv), \quad (7)$$

отличающийся от выражения, приведенного в ур-нии (15) главы II, наличием логарифмического члена. Гордоном²⁾ однако было показано, что в соответствии с ур-нием (16) главы II волновая функция, описывающая рассеяние, выражается общей формулой

$$\psi(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n e^{i\eta_n} L_n(r) P_n(\cos \theta) \quad (8)$$

и может быть представлена в следующем виде³⁾:

$$e^{-\frac{1}{2} i\pi\alpha} \Gamma(1+i\alpha) e^{ikr \cos \theta} {}_1F_1[-i\alpha; 1; ikr(1-\cos \theta)] \quad (9)$$

с асимптотическим выражением

$$I + Sf(\theta)$$

где

$$I = \exp [ikz + i\alpha \lg k(r-z)], \quad (10)$$

$$S = r^{-1} \exp [ikr - i\alpha \lg kr]; \quad (11)$$

$|f(\theta)|$ определяется выражением (5), а фаза $f(\theta)$ — ур-нием (16) этой главы.

¹⁾ Rutherford, Chadwick and Ellis, Radiations from radioactive substances стр. 191; Andrade, The structure of the Atom, стр. 21.

¹⁾ Это доказывается в § 4, где определяется η_n .

²⁾ Gordon, Zs. f. Physik 48, 180, 1928.

³⁾ Функция ${}_1F_1$ определена в § 3 этой главы.

Выражения (10) и (11) для падающей и рассеянной волн соответствуют кулонову полю. Форма их может быть объяснена следующим образом.

Если мы будем рассматривать все классические гиперболические орбиты с одной общей асимптотой, направленной справа налево параллельно оси z , мы должны ожидать, что фронт падающей волны окажется нормальным ко всем этим гиперболам. На больших расстояниях от ядра поверхность, перпендикулярная к этим гиперболам, будет характеризоваться не уравнением $z = \text{const}$, но, как это было показано Гордоном, уравнением:

$$z + \frac{ZZ'\epsilon^2}{mv^2} \lg k(r-z) = \text{const}.$$

Падающая волна даже на бесконечном расстоянии искажена ядром, с которым она сталкивается. Мы должны, поэтому, ожидать, что она будет иметь вид:

$$\exp \left\{ ik \left[z + \frac{ZZ'\epsilon^2}{mv^2} \lg k(r-z) \right] \right\}.$$

Эта функция весьма сходна с выражением (10). Выражение для рассеянной волны (11) может быть интерпретировано аналогичным образом.

В следующих параграфах мы покажем, что функция (9) является решением волнового уравнения, и что она обладает асимптотической формой, определяемой формулами (10), (11) и (5). Мы не будем при этом пользоваться разложением (8) (применяющимся в методе Гордона), а будем решать волновое уравнение непосредственно. Впервые такой метод был применен Темплом¹⁾.

§ 2. Решение волнового уравнения для случая рассеяния кулоновым полем

Мы будем решать волновое уравнение вида:

$$\nabla^2 \psi + \left(k^2 - \frac{\beta}{r} \right) \psi = 0 \quad (\beta = 8\pi^2 m ZZ' \epsilon^2 / h^2). \quad (12)$$

Полагая

$$\psi = e^{ikz} F,$$

мы получим

$$\nabla^2 F + 2ik \frac{\partial F}{\partial z} - \frac{\beta F}{r} = 0. \quad (13)$$

Это дифференциальное уравнение имеет решение вида

$$F = F(r-z).$$

Подставив это решение в уравнение, мы получим

$$2 \left(1 - \frac{z}{r} \right) F'' + \frac{2}{r} F' + 2ik \left(\frac{z}{r} - 1 \right) F' - \frac{\beta}{r} F = 0.$$

Умножая это уравнение на r , мы видим, что r и z входят в уравнение только в комбинации $r-z$, откуда следует, что решение искомого типа действительно существует. Полагая

$$\zeta = r - z,$$

мы получаем

$$\zeta \frac{d^2 F}{d\zeta^2} + \frac{dF}{d\zeta} - ik\zeta \frac{dF}{d\zeta} - \frac{1}{2} \beta F = 0. \quad (14)$$

Если мы выберем в качестве решения функцию

$$F = \zeta^\rho (1 + a_1 \zeta + a_2 \zeta^2 + \dots),$$

то характеристическое уравнение даст нам $\rho^2 = 0$; решение, являющееся конечным в начале координат имеет, таким образом, вид:

$$F = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \zeta^n.$$

Подставляя это выражение в уравнение (14) и приравнивая нулю коэффициенты при ζ^n , мы получаем рекуррентную формулу

$$[n(n+1) + (n+1)] a_{n+1} = a_n \left[ikn + \frac{1}{2} \beta \right],$$

откуда

$$a_{n+1} = (ik)^{n+1} \prod_{s=0}^n \frac{\left(s + \frac{1}{2} \beta / ik \right)}{(s+1)^2}.$$

Отсюда следует, что F представляет собой рассматриваемую в § 3 этой главы гипергеометрическую функцию

$$F = {}_1F_1(-ia; 1; ik\zeta),$$

где

$$\alpha = \frac{1}{2} \beta / k = 2\pi ZZ' \epsilon^2 / hv.$$

Асимптотическое разложение F приведено в § 3; из уравнения (24) следует, что $F = W_1 + W_2$, где при больших r :

$$W_1 \sim (-ik\zeta)^{ia} G_1 / \Gamma(1+ia)$$

$$W_2 \sim (ik\zeta)^{-ia-1} e^{ik\zeta} G_2 / \Gamma(-ia),$$

а

$$G_1 = 1 + \frac{-a^2}{ik\zeta} + \dots$$

$$G_2 = 1 + (1+ia)^2 / ik\zeta + \dots$$

¹⁾ Temple, Proc. Roy. Soc. A, 121, 673, 1928.

Воспользовавшись этим разложением с точностью до членов ζ^{-1} , мы получаем

$$W_1 \sim \frac{e^{\frac{1}{2}\pi\alpha}}{\Gamma(1+ia)} \left(1 - \frac{\alpha^2}{ik\zeta}\right) \exp(ia \lg k\zeta)$$

$$W_2 \sim \frac{-ie^{\frac{1}{2}\pi\alpha}}{\Gamma(-ia)} \frac{e^{ik\zeta}}{k\zeta} \exp(-ia \lg k\zeta).$$

Функции W_1 и W_2 , будучи умножены на $\exp(ikz)$, представляют соответственно падающую и рассеянную волны. Нас интересует падающая волна с единичной амплитудой; в качестве полной волновой функции, характеризующей рассеяние, мы возьмем поэтому¹⁾

$$\psi(r, \theta) = e^{-\frac{1}{2}\pi\alpha} \Gamma(1+ia) e^{ikz} {}_1F_1(-ia; 1; ik\zeta), \quad (15)$$

где $a = 2\pi ZZ'e^2/hv$, $\zeta = r - z = r(1 - \cos\theta)$.

Эта волновая функция имеет асимптотический вид:

$$\psi \sim I + Sf(\theta),$$

где $I = [1 - \alpha^2/ik(r-z)] \exp[ikz + ia \lg k(r-z)]$,

$$S = r^{-1} \exp[ikr - ia \lg kr],$$

$$f(\theta) = \frac{ZZ'e^2}{2mv^2} \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} \exp[-ia \lg(1 - \cos\theta) + i\pi + 2i\eta_0], \quad (16)$$

при чем

$$\exp 2i\eta_0 = \Gamma(1+ia)/\Gamma(1-ia).$$

Заметим, что Z' в этих формулах равно $+2$ для α -частиц и -1 для электронов.

Волновые фронты падающей и рассеянной волн характеризуются выражениями (10) и (11).

Интенсивность рассеяния $I(\theta)$ определяется выражением:

$$I(\theta) = |f(\theta)|^2 = \left[\frac{ZZ'e^2}{2mv^2} \right]^2 \operatorname{cosec}^4 \frac{\theta}{2},$$

тождественным с формулой Резерфорда.

¹⁾ *Зоммерфельд*, *Ann. d. Physik* 11, 257, 1931, дает следующую формулу для этой функции:

$$\psi(r, \theta) = e^{-\frac{1}{2}\pi\alpha} e^{ikr} \int_0^\infty x^{ia} e^{-x} J_0(2\sqrt{ik\zeta x}) dx,$$

где J_0 — функция Бесселя.

Примечание. В начале координат ур-ние (15) дает

$$|\psi|^2 = 2\pi\alpha/(e^{2\pi\alpha} - 1). \quad (17)$$

В случае сил отталкивания, имеющих, например, место между альфа-частицами и ядром, величина α положительна. Если значение α велико и положительно, как, например, для медленных альфа-частиц, то $|\psi|^2$ очень мало в начале координат. Это означает, что вблизи ядра проходит очень мало частиц.

Если α велико и отрицательно, как, например, для медленных электронов, то $|\psi|^2$ будет достаточно велико в начале координат, — порядка $|\alpha|$.

Если же α мало, то решение ур-ния (15) во всех точках пространства не будет заметно отличаться от плоской волны $\exp(ikz)$.

Условие малости α является также условием применимости приближения Борна (глава VII), рассматривающего $V(r)$ как возмущение. Это легко заметить, переписав волновое уравнение в единицах длины $\frac{1}{k}$:

$$\nabla^2 \psi + \left(1 - \frac{2\alpha}{r}\right) \psi = 0.$$

§ 3. Обобщенные гипергеометрические ряды

В этом параграфе мы ознакомимся с некоторыми свойствами функции

$${}_1F_1(a; b; z) = 1 + \frac{a}{b \cdot 1} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1) \cdot 1 \cdot 2} z^2 + \dots, \quad (18)$$

введенной нами в рассмотрение в § 2. В дальнейшем мы будем отбрасывать индексы, так как другими функциями гипергеометрического типа мы пользоваться не предполагаем. Функция $M_{k,m}(z)$, введенная Уиттекером¹⁾ (конфлюэнтная гипергеометрическая функция) связана с нашей функцией уравнением

$$M_{k,m} = z^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{z}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + m - k; 2m + 1; z\right).$$

Заметим, что $F(a; b; z)$ является решением дифференциального уравнения

$$z \frac{d^2 y}{dz^2} + (b - z) \frac{dy}{dz} - ay = 0. \quad (19)$$

Нас интересует асимптотическое разложение функции $F(a; b; z)$ для больших значений $|z|$ при постоянных значениях a и b . Разложение это является общеизвестным. Мы приведем его здесь в виду его важности для задач, связанных с кулоновыми силами. Доказательство его дано Уиттекером²⁾.

Мы ограничимся рассмотрением [того случая, когда b — целое положительное число, а z — комплексно.

¹⁾ *Уиттекер и Ватсон*, Курс современного анализа, ч. II, ГТТИ, 1934, стр. 139.

²⁾ *Ibid.*, стр. 146.

Рассеяние пучка частиц кулоновым полем

Преобразуем функцию F в интеграл, взятый по контуру. Для этого воспользуемся теоремой, согласно которой для любого положительного целого m

$$\frac{1}{m!} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} e^t t^{-m-1} dt, \quad (20)$$

где γ — произвольный замкнутый путь, окружающий начало координат и направленный против часовой стрелки. Доказательство этого соотношения элементарно.

Функция F может быть представлена в следующем виде:

$$F(a; b; z) = (b-1)! \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n / (b+n-1)!,$$

где c_n — коэффициент при x^n в разложении $(1-x)^{-a}$. С помощью соотношения (20), полагая $m = b+n-1$, получаем

$$F(a; b; z) = \frac{(b-1)!}{2\pi i} \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \int_{\gamma} e^t t^{-b-n} dt.$$

Выбирая контур γ таким образом, чтобы во всех его точках удовлетворялось условие:

$$|z/t| < 1,$$

мы можем переставить порядок суммирования и интегрирования, так как ряды сходятся для всех значений t . Мы получаем при этом:

$$F(a; b; z) = \frac{(b-1)!}{2\pi i} \int_{\gamma} \left(1 - \frac{z}{t}\right)^{-a} e^t t^{-b} dt. \quad (22)$$

Заметим, что, в силу соотношения (21), контур интегрирования γ должен окружать точку $t=z$. Мы можем поэтому, не изменяя величины интеграла, преобразовать γ в любой замкнутый контур, окружающий точки $t=0$ и $t=z$.

Для нахождения асимптотического разложения (22) преобразуем γ в контур γ' , изображенный на рис. 4. Благодаря наличию в подынтегральной функции множителя e^t , те части γ' , для которых вещественная часть t велика и отрицательна, существенной роли не играют. Если части контура γ' , обозначенные на рис. 4 буквами AB и CD , мы будем удалять на бесконечное расстояние от мнимой оси, то выражение (22) можно будет заменить суммой двух интегралов, один из которых берется по нижней части контура, второй — по верхней. Положим соответственно

$$F(a; b; z) = W_1(a; b; z) + W_2(a; b; z), \quad (23)$$

где

$$W_1(a; b; z) = \frac{(b-1)!}{2\pi i} \int_{\gamma_1} \left(1 - \frac{z}{t}\right)^{-a} e^t t^{-b} dt$$

и γ_1 меняется от $-\infty$ до $-\infty$ при обходе начала координат против направления движения часовой стрелки. Функция W_2 определяется точно таким же выражением, но интегрирование производится по контуру, охватывающему точку $t=z$. Подставляя в выражение для W_2

$$t-z = u,$$

мы преобразуем тем самым контур интегрирования в контур γ_1 , охватывающий начало координат; мы получаем при этом

$$W_2(a; b; z) = \frac{(b-1)!}{2\pi i} \int_{\gamma_1} u^{-a} e^{u+z} \frac{du}{(u+z)^{-a+b}}.$$

Мы можем теперь воспользоваться асимптотическим разложением W_1 и W_2 . Имеем

$$W_1 = \frac{(b-1)!}{2\pi i} (-z)^{-a} \int_{\gamma_1} \left(1 - \frac{t}{z}\right)^{-a} e^t t^{a-b} dt,$$

$$W_2 = \frac{(b-1)!}{2\pi i} (+z)^{a-b} e^z \int_{\gamma_1} \left(1 + \frac{t}{z}\right)^{a-b} e^t t^{-a} dt.$$

Разложив в ряд выражения, стоящие в круглых скобках и воспользовавшись соотношением

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_1} e^t t^{-x} dt,$$

мы получаем:

$$\left. \begin{aligned} W_1 &\sim \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-z)^{-a} G(a, a-b+1; -z) \\ W_2 &\sim \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} G(1-a, b-a; z), \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

где функции G — полусходящиеся ряды вида:

$$G(\alpha, \beta; z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{z \cdot 1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{z^2 \cdot 2!} + \dots$$

С помощью выражения (23) мы получаем асимптотическое разложение функции F .

§ 4. Решение уравнения

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dL}{dr} \right) + \left[\frac{8\pi^2 m}{k^2} \left(E - \frac{ZZ'\epsilon^2}{r} \right) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right] L = 0. \quad (25)$$

Это уравнение отличается от уравнения Шредингера для случая водородного атома лишь заменой члена $-\frac{\epsilon^2}{r}$ членом $\frac{ZZ'\epsilon^2}{r}$. Для нас представляет интерес случай положительного значения энергии.

С помощью подстановки

$$L = r^n e^{ikr} F, \quad (k^2 = 8\pi^2 m E / \hbar^2),$$

мы можем привести ур-ние (25) к виду

$$r \frac{d^2 F}{dr^2} + [2ikr + (2n+2)] \frac{dF}{dr} - \left[\frac{8\pi^2 m ZZ'\epsilon^2}{k^2} - ik(2n+2) \right] F = 0.$$

Введение новой независимой переменной

$$z = -2ikr$$

приводит к уравнению

$$z \frac{d^2 F}{dz^2} + (2n+2-z) \frac{dF}{dz} - (i\alpha + n + 1) F = 0.$$

Это уравнение аналогично ур-нию (19) и обладает решением

$$F(i\alpha + n + 1; 2n + 2; z), \quad (26)$$

Второе решение ур-ния (25) не является конечным в начале координат.

Асимптотическое разложение этой функции может быть получено с помощью формул (24). Если решение ур-ния (25) взято в виде

$$L_n(r) = e^{-\frac{1}{2}\pi\alpha} \frac{|\Gamma(n+1+i\alpha)|}{(2n+1)!} (2kr)^n e^{ikr} F(i\alpha+n+1; 2n+2; -2ikr),$$

то первый член асимптотического разложения имеет вид:

$$L \sim (kr)^{-1} \sin \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n - \alpha \lg 2kr \right),$$

где

$$\eta_n = \arg \Gamma(n+1+i\alpha).$$

Второе решение ур-ния (25). Можно показать, что если W_1 и W_2 — определенные в § 3 функции, то выражения

$$r^n e^{ikr} W_\mu(i\alpha + \nu + 1; 2n + 2; -2ikr),$$

где μ равно 1 или 2, являются независимыми решениями уравнения (25). Так как асимптотическая форма W_μ известна, то общее решение может быть получено в соответствии с любой асимптотической формой его.

Поведение этого решения вблизи начала координат было исследовано Секслем ¹⁾ для случая $n=0$. Он нашел, что функция

$$e^{ikr} \Gamma(1+i\alpha) W_2(1+i\alpha; 2; -2ikr),$$

имеющая асимптотическую форму

$$e^{-ikr} (kr)^{i\alpha-1},$$

может быть разложена по возрастающим степеням r :

$$\frac{-\exp \left[-i\alpha \lg 2 + \frac{1}{2} \pi\alpha \right]}{kr \Gamma(1-i\alpha)} e^{-ikr} \left[1 + \sum_{n=0}^{\infty} (2ikr)^n c_n \lg(2ikr + d_n) \right],$$

где

$$c_n = \Gamma(n-i\alpha) / \Gamma(n) \Gamma(n+1) \Gamma(-i\alpha),$$

$$d_n = \frac{1}{-i\alpha} + \frac{1}{-i\alpha+1} + \dots + \frac{1}{-i\alpha+n-1} +$$

$$+ \frac{\Gamma'(-i\alpha)}{\Gamma(-i\alpha)} + \frac{1}{n} - 2 \left(\frac{1}{1} + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n} \right) + 2C$$

$$(C = 0,577\dots).$$

¹⁾ *Sexl, Zs. f. Phys. 56, 62, 1929.*

ГЛАВА IV

СПИН ЭЛЕКТРОНА

§ 1. Магнитный момент атома

При рассмотрении некоторых задач теории столкновений оказывается необходимым принимать во внимание спин электрона.

Гипотеза, согласно которой электрон обладает осью симметрии и, следовательно, четвертой степенью свободы, была введена в 1925 г. незадолго перед установлением новой квантовой механики, с целью объяснения наличия четырех квантовых чисел, которые оказались необходимыми для классификации энергетических уровней атома. В новой квантовой теории методы описания спина были развиты Паули¹⁾ и Дарвином²⁾. Основываясь на чисто релятивистской трактовке волнового уравнения, Дирак³⁾ показал затем, что наличие спина является непосредственным следствием принципа относительности. В начале этой главы мы будем придерживаться трактовки Паули, оказывающейся достаточной в тех случаях, когда наличие спина влияет лишь на свойства симметрии волновых функций, тогда как действием спиновых сил можно пренебречь. Это имеет место во всех тех случаях, когда скорость рассматриваемых электронов мала по сравнению со скоростью света. Мы покажем далее как связана подобная трактовка с теорией Дирака и рассмотрим те задачи теории столкновений, в которых спиновыми силами пренебречь нельзя.

В релятивистской теории Дирака спиновые свойства электрона могут быть получены на основании весьма общих соображений. В более элементарной трактовке свойства спина устанавливаются обычно на основании экспериментальных данных и описывают их затем в терминах волновой механики. Мы будем исходить из того обстоятельства, что согласно опытам Штерна и Герлаха атом с одним электроном в состоянии S обладает магнитным моментом, равным $\frac{eh}{4\pi mc}$ (Боровскому магнетону). Для простоты мы будем говорить об атоме водорода.

Заметим прежде всего, что если направление магнитного момента водородного атома первоначально не было известно, то нет такого опыта, с помощью которого оно могло бы быть определено. Это может быть

¹⁾ Pauli, Zs. f. Physik, 43, 601, 1927.

²⁾ Darwin, Proc. Roy. Soc. A, 116, 227, 1927; см. также Дирак, Квантовая механика.

³⁾ Dirac, Proc. Roy. Soc. A, 117, 610, 1928.

показано с помощью следующих соображений. Предположим, что сделана попытка измерить поле H вне атома с целью определения направления его магнитного момента. Подобная попытка может быть осуществлена путем пропускания электрона мимо атома и наблюдения отклонения, испытываемого электроном. Порядок величины этого отклонения может быть определен следующим образом: если электрон проходит на расстоянии r от атома, то порядок величины H в соответствующей точке:

$$H \sim M/r^3 \quad (M = eh/4\pi mc).$$

Действующая на электрон сила¹⁾ равна $\frac{eHv}{c}$. Эта сила действует на электрон в течение промежутка времени порядка r/v и создает, таким образом, момент порядка $\frac{eHr}{c}$. Вызываемое ею отклонение равняется,

следовательно: $\frac{eHr}{mcv}$. Для того, чтобы это отклонение могло быть наблюде-
но, оно должно быть больше естественного распыливания пучка характеризующих электрон волн. Если Δr — ширина этого пучка, то распыливание его — $h/mv\Delta r$. Должно соблюдаться, таким образом, следующее условие:

$$eHr/mcv > h/mv\Delta r.$$

Подставляя в него значение H , мы получаем:

$$\Delta r/r > r/r_e \quad (r_e = e^2/mc^2 \sim 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см}).$$

Для того, чтобы эффект оказался наблюдаемым, r должно быть больше радиуса атома. Мы видим, таким образом, что Δr по крайней мере в 20 000 раз больше, нежели r . Наблюдение оказывается поэтому невозможным.

Момент отдельного атома может быть определен только с помощью опыта Штерна-Герлаха, но опыт этот оказывает на атом некоторое возмущающее воздействие. Опыт Штерна-Герлаха показывает, что в магнитном поле H атом водорода приобретает дополнительную энергию, равную $\pm MH$; оказывается, далее, возможным отделить атомы, обладающие двумя различными значениями энергии. Мы видели, что направление магнитного момента не может быть определено; мы будем поэтому считать, что если направление магнитного

момента атома определяется единичным вектором \vec{l} , то это значит, что атом прошел через неоднородное магнитное поле H с направлением \vec{l} и что он находился в отклоненном пучке с энергией — HM .

Посмотрим теперь — в каком отношении этот атом является отличным от любого другого атома? Могут ли быть сделаны какие-либо предсказания относительно дальнейшего поведения такого атома в отличие от

¹⁾ Если пренебречь влиянием спина электрона и рассматривать его как точечный заряд.

других атомов? Мы видели, что направление его магнитного момента измерено быть не может. Мы можем, однако, подвергнуть его воздействию второго неоднородного магнитного поля H' , в результате чего он примет новое направление \vec{l}' , и посмотреть — будет ли он обладать в этом новом поле энергией $\pm H'M$? На основании знания предыдущего поведения атома мы можем определить вероятность того, что атом будет обладать одним из этих двух значений энергии ¹⁾. В том частном случае, когда направления \vec{l} и \vec{l}' совпадают, энергия будет, конечно, равняться $-H'M$. Покажем теперь, каким образом вычисляется вероятность в более общем случае. Для этого мы должны, прежде всего, перейти к обозначениям квантовой механики.

Атом, магнитный момент которого ориентирован в направлении \vec{l} , мы будем описывать волновой функцией:

$$\chi_l(s).$$

Аргумент волновой функции s характеризует наблюдаемые величины, а именно — энергию, которой атом обладал бы при пропускании через второе неоднородное магнитное поле. Выберем произвольное направление в пространстве, например ось z , и обозначим через $H'Ms$ ту энергию, которой обладал бы атом в магнитном поле H' этого направления. Вероятность того, что эта энергия будет обладать данным значением, определяется величиной $|\chi(s)|^2$. Мы знаем, что χ отлично от нуля только при $s = \pm 1$. Функция χ имеет, таким образом, только два отличных от нуля значения: $\chi(+1)$ и $\chi(-1)$; квадраты модулей этих значений определяют вероятности того, что энергия будет равняться $\pm MH'$. Ясно, что величина $|\chi_l(s)|^2$ будет зависеть только от угла между направлением \vec{l} и направлением оси z .

Если вектор \vec{l} направлен по оси z , так что энергия равна $-MH$, то

$$\left. \begin{aligned} \chi(+1) &= 0 \\ \chi(-1) &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Обозначим эту функцию через $\chi_\beta(s)$. Через χ_α обозначим соответствующую функцию, для которой \vec{l} имеет противоположное направление:

$$\left. \begin{aligned} \chi_\alpha(+1) &= 1 \\ \chi_\alpha(-1) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Заметим, что определенные таким образом функции χ_α и χ_β нормированы и взаимно ортогональны.

¹⁾ За исключением того случая, когда поле изменяется столь резко, что атом переходит от H к H' за время, малое по сравнению с периодом Ларморовой прецессии; в таком случае расщепление места не имеет. См. работу Rosen and Zener, Phys. Rev., 40, 502, 1932.

Волновые функции χ_α и χ_β описывают два стационарных состояния системы, т. е. два состояния, энергия которых известна. Общее состояние системы характеризуется волновой функцией

$$A\chi_\alpha + B\chi_\beta,$$

где A и B — произвольные комплексные постоянные, удовлетворяющие условию нормирования:

$$AA^* + BB^* = 1.$$

На основании инвариантности по отношению к повороту координатных осей можно показать ¹⁾, что если направление магнитного момента атома определяется сферическими координатами θ и φ , и если параметр s характеризует энергию в магнитном поле, направленном по оси z ($\theta = 0$), то

$$B/A = -\operatorname{ctg} \frac{1}{2} \theta e^{i\varphi}, \quad (3)$$

или, пренебрегая произвольным фазовым множителем:

$$A = -\sin \frac{\theta}{2}, \quad B = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi}.$$

Вероятность того, что в новом поле атом будет обладать энергией $-MH$, определяется, таким образом, величиной $\cos^2 \frac{\theta}{2}$, а вероятность обладания энергией $+MH$ определяется величиной $\sin^2 \frac{\theta}{2}$.

Вероятность нахождения электрона на данном расстоянии r от ядра будет приблизительно такой же, как если бы атом не испытывал воздействия магнитного поля; она определяется квадратом шредингеровской волновой функции:

$$\psi(r) = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-r/a_0}.$$

Полная волновая функция атома представляет собой произведение

$$\psi(r)\chi(s).$$

Эта волновая функция является приближенной, так как распределение заряда в атоме может зависеть также и от ориентации спина в магнитном поле.

Мы можем, однако (более точно), описать атом с помощью волновой функции

$$\psi(\vec{r}, s) \quad (s = 1, -1); \quad (4)$$

Эта функция может быть интерпретирована следующим образом: произведение

$$|\psi(\vec{r}, s)|^2 dx dy dz, \quad \text{при } s = 1$$

¹⁾ Дирак, Основы квантовой механики, ГТТИ, 1936.

определяет вероятность того, что в магнитном поле, направленном по оси z , атом будет обладать энергией $+MH$, а электрон будет при этом находиться в элементе объема $dx dy dz$.

Вид функции $\psi(\vec{r}, s)$ может быть определен лишь с помощью релятивистской теории электрона, созданной Дираком. Заметим, что совершенно безразлично — пользуемся ли мы волновой функцией в виде (4)

или же пишем две отдельные функции от \vec{r} , $\psi_a(\vec{r})$ и $\psi_b(\vec{r})$. Для скоростей электрона, значительно меньших скорости света, как ψ_a , так и ψ_b являются приближенными решениями уравнения Шредингера.

§ 2. Магнитный момент электрона

До сих пор мы занимались лишь рассмотрением магнитного момента атома. Мы не будем останавливаться здесь на рассмотрении полученных с помощью аномального эффекта Зеемана, гиромангнитного эффекта и т. д. данных, согласно которым электрон обладает четвертой степенью свободы, которой соответствует магнитный момент $e\hbar/4\pi mc$

и механический момент $\frac{1}{2} \hbar/2\pi$. Мы ограничимся лишь замечанием, что согласно теории Шредингера основное состояние атома водорода является невырожденным и, следовательно, для объяснения расщепления в магнитном поле, обнаруженного опытами Штерна и Герлаха, необходимо предположить, что электрон обладает четвертой степенью свободы.

Сведения о том, что электроны обладают магнитным моментом, были первоначально получены на основании изучения их поведения в атомах. Для изучения явлений столкновения необходимо выяснить, какой смысл может быть приписан магнитному моменту свободного электрона. Прежде всего, точно так же, как и в случае атома, определение магнитного момента электрона с помощью магнетометрических опытов оказывается невозможным. Это может быть показано с помощью следующих соображений, принадлежащих Бору¹⁾. Предположим, что положение электрона известно с точностью Δr , и что мы хотим определить магнитный момент по создаваемому полю в точке, находящейся на расстоянии r от него. Какие-либо заключения относительно магнитного момента электрона на основании наших измерений могут быть сделаны лишь в том случае, если

$$\Delta r \ll r. \quad (5)$$

Поле H будет порядка величины:

$$H \sim \frac{1}{r^3} M.$$

Если электрон движется со скоростью v , то при его движении будет создаваться магнитное поле порядка $\frac{ev}{cr^2}$; мы не можем, однако, точно

¹⁾ См. *Mott, Proc. Roy. Soc. A. 124, 440, 1929.*

определить это поле, так как величина v нам точно не известна. На основании наших измерений магнитного поля мы можем, таким образом, сделать какие-либо заключения относительно магнитного момента электрона только в том случае, если

$$M/r^3 \gg \epsilon \Delta v / cr^2,$$

где Δv — неточность в определении v . Согласно принципу неопределенности:

$$\Delta r \Delta v > \hbar/m.$$

что приводит к неравенству

$$\Delta r \gg r,$$

противоречащему неравенству (5). Отсюда можно заключить, что измерение магнитного момента электрона с помощью подобного рода опытов невозможно.

Покажем теперь, что с помощью опыта Штерна-Герлаха определение магнитного момента свободного электрона, или же получение пучка электронов, магнитные моменты которых обладали бы одним и тем же направлением, — невозможно. Это доказательство также принадлежит Бору.

На рис. 5 показан пучок электронов, движущийся параллельно оси Oz (т. е. перпендикулярно плоскости чертежа). На рисунке изображены полюса магнита, а также силовые линии. Опыт ставится с целью наблюдения расщепления в направлении оси Oy . Воздействующая на электрон сила, стремящаяся расщепить пучок, равна:

$$\pm M \frac{\partial H_y}{\partial y}. \quad (6)$$

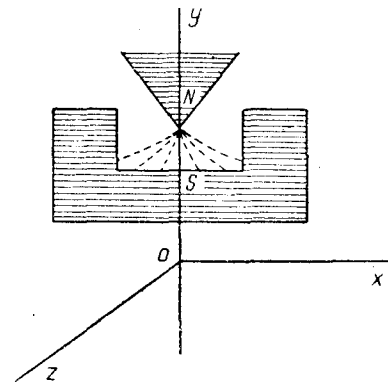


Рис. 5.

Все электроны будут испытывать также воздействие, обусловленное их движением в магнитном поле. Электроны, движущиеся в плоскости Oyz , будут находиться под действием силы, направленной по Ox . Эта сила перпендикулярна к направлению расщепления, ее влияние будет сказываться лишь в смещении пучка вправо или влево. Однако электроны, не находящиеся в плоскости Oyz , будут испытывать действие силы, направленной вдоль Oy , так как силовые линии в неоднородном магнитном поле не могут быть прямыми, и, следовательно, H должно иметь составляющую H_x вдоль оси Ox . Эта сила будет порядка величины

$$ev H_x / c. \quad (7)$$

Сравним выражение (7) с формулой (6), определяющей расщепляющую силу. H_x на расстоянии Δx от плоскости Oyz равняется $\frac{\partial H_x}{\partial x} \Delta x$, или,

так как $\operatorname{div} \vec{H} = 0$, оно равняется $-\frac{\partial H_y}{\partial y} \Delta x$. Величины (6) и (7) относятся друг к другу как:

$$\frac{\epsilon h}{4\pi mc} \frac{\partial H_y}{\partial y} : \frac{\epsilon v}{c} \frac{\partial H_y}{\partial y} \Delta x,$$

или же как:

$$1 : 4\pi \Delta x / \lambda, \quad (7.1)$$

где λ — длина волн, характеризующих электроны. Предположим теперь, что $\pm \Delta x$ — расстояние двух границ пучка от плоскости Oyz . Так как Δx должно быть больше λ , ясно, что границы пучка отклонены в противоположных направлениях под углами, превышающими угол расщепления.

Для доказательства того, что наблюдение какого-либо расщепления невозможно, рассмотрим след, оставляемый пучком на фотографической пластинке. Предположим, что оказалось бы возможным получить пучки более тонкие, нежели это допускается принципом неопределенности, так что толщина Δy пучка в направлении y оказалась бы бесконечно малой. До прохождения пучка через магнитное поле его поперечное сечение будет иметь форму, изображенную на рис. 6а. После прохождения через поле оно будет иметь форму, изображенную на рис. 6б, где показан след, оставленный пучком на фотографической пластинке. Наблюдающееся отклонение обусловлено Лоренцовыми силами, рассмотренными выше. Если ABC и $A'B'$ — две линии, параллельные плоскости Oy и находящиеся на расстоянии λ друг от друга, то с помощью ур-ния (7.1) можно показать, что отклонение столь велико, что $AB > BC$. Если линия $A\beta\gamma$ проведена перпендикулярно к следам электронов, это значит, что $A\beta > \beta\gamma$. Но $A\beta < \lambda$ и, следовательно, $\beta\gamma$ — расстояние между следами — меньше, нежели λ . Максимальное возможное расстояние между ними равняется таким образом λ . В действительности, однако, мы не можем получить линию ширины порядка λ . Наблюдение какого-либо расщепления оказывается, таким образом, невозможным.

На основании этих соображений мы должны прийти к заключению, что приписание магнитного момента свободному электрону является бессмысленным. Если электрон находится в атоме в S -состоянии, то атом обладает магнитным моментом и это обстоятельство является свойством атомного электрона. В релятивистской трактовке электрона, принадлежащей Дираку, этот магнитный момент равняется $\epsilon h/4\pi mc$ только в том случае, когда скорости электрона внутри атома малы по сравнению со скоростью света (§ 3.3). Согласно теории Дирака, отдельный электрон, находящийся в низшем состоянии в поле ядра с зарядом Ze , обуславливает магнитный момент ¹⁾:

$$\frac{1}{3} [1 + 2\sqrt{1 - \gamma^2}] \epsilon h/4\pi mc \quad (\gamma = 2\pi Ze^2/hc). \quad (8)$$

¹⁾ Эта формула принадлежит Брейту (*Breit*, *Nature* **122**, 649, 1928. См. § 3.3 этой главы).

Утверждение, согласно которому свободный электрон обладает четырьмя степенями свободы, имеет совсем другой смысл, так как едва ли можно себе представить, что в атоме он обладает четырьмя степенями свободы, в свободном же состоянии — тремя. Интересно установить: имеются ли какие-либо опыты, с помощью которых эта четвертая степень свободы могла бы быть обнаружена? В частности, — можно ли получить пучок электронов, в некотором смысле „поляризованный“, и можно ли обнаружить эту поляризацию?

В настоящее время нет никаких экспериментальных данных, отвечающих на этот вопрос; теоретические соображения показывают, однако, что принципиально возможно как получение такого поляризованного пучка, так и обнаружение его поляризации. Рассмотрим следующий опыт ¹⁾. Пучок атомов получается с помощью опыта Штерпа-Герлаха, причем оси атомов обладают одним и тем же направлением например, вдоль оси z . При освещении атомов ультрафиолетовым светом происходит испускание электронов. Получаемый подобным образом электронный

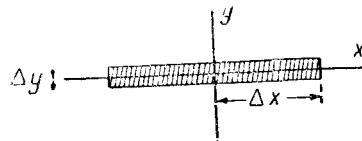


Рис. 6а.

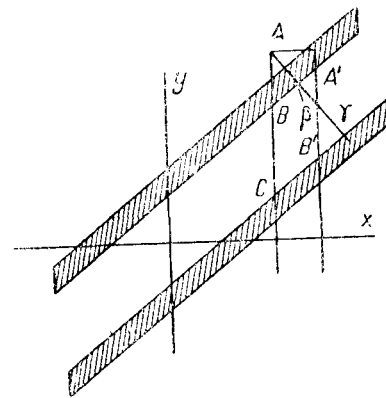


Рис. 6б.

пучок можно назвать поляризованным на основании следующих соображений. Предположим, что электрон ведет себя подобно маленькому магниту, и спросим себя, могут ли силы, достаточные для вырывания электрона из атома, вызвать заметное изменение направления магнитного момента? Следующие, чисто классические соображения о порядке величины возникающих при этом сил показывают, что это невозможно; мы можем поэтому считать, что в пучке испускаемых электронов все магнитные моменты обладают одним и тем же направлением ²⁾.

Если электрическое поле напряженности E действует на электрон в течение промежутка времени t , то электрон приобретает кинетическую энергию, равную $\frac{1}{2} (Ee)^2 t^2/m$. Энергия, которая должна быть сообщена электрону для удаления его из атома, равна по порядку величины $m\epsilon^4/h^2$. Таким образом для удаления электрона из атома произведение E на t

¹⁾ *Fues und Hellmann*, *Phys. Zs.* **31**, 465, 1930.

²⁾ Имеется, конечно, малая вероятность того, что направление оси спина изменится на обратное; ближайшее рассмотрение показывает, что эта вероятность порядка $(1/137)^2$. Однако методов, с помощью которых мог бы быть получен вполне поляризованный пучок, не существует.

должно быть порядка величины $E t \sim \epsilon m / h$. Средняя скорость электрона в атоме равняется ϵ^2 / h . Среднее значение момента пары сил, действующей на электронный магнит и обусловленной его движением в электрическом поле E , будет порядка:

$$E \frac{\epsilon h}{m c} \frac{\epsilon^2}{h} \frac{1}{c},$$

т. е. $E \epsilon^3 / m c^2$ ¹⁾. Для изменения ориентации электрона на угол порядка π , эта пара сил должна создать изменение углового момента порядка h . Необходимое для этого время T определяется следующим соотношением:

$$T \frac{E \epsilon^3}{m c^2} \sim h,$$

откуда следует:

$$E T \sim h m c^2 / \epsilon^3.$$

Мы получаем, таким образом:

$$\frac{E T}{E t} \sim \left(\frac{h c}{\epsilon^2} \right)^2,$$

т. е.

$$T \gg t.$$

Если бы поляризованный пучок не мог быть обнаружен экспериментально, не имело бы никакого смысла говорить о нем. Рассмотрим прохождение электронного пучка через газ, содержащий ионизованные атомы, так чтобы некоторые из электронов при этом захватывались. Если бы с помощью опыта Штерна-Герлаха удалось установить, что образующиеся нейтральные атомы являются поляризованными, мы имели бы метод обнаружения поляризации. Приведенные выше соображения относительно порядка сил указывают, что это действительно имело бы место; строгое доказательство этого положения может быть получено с помощью теории Дирака.

Другой, менее непосредственный, однако, по всей вероятности более практический метод получения и обнаружения поляризованного пучка электронов рассмотрен в § 4.1.

Мы видим, таким образом, что спин свободного электрона может быть описан с помощью той же волновой функции $\chi_i(s)$, которой мы пользовались раньше для описания магнитного момента атома. Функция

$$|\chi_i(s)|^2 \quad (s = \pm 1)$$

определяет вероятность того, что если электрон, обладающий магнитным моментом направления \vec{l} , захвачен атомом, помещенным затем в неоднородное магнитное поле, то энергия этого атома равняется $\pm M H$. Приписание квадрату амплитуды волновой функции этой несколько

¹⁾ Заметим, что при движении частицы со скоростью v в электрическом поле E , последнее действует на нее как магнитное поле с напряженностью $H = \frac{v}{c} E \sin(v, E)$.

(Прим. ред.).

сложной интерпретации является необходимым, так как измерение энергии электрона в магнитном поле возможно лишь в том случае, когда электрон находится внутри атома. Отметим далее, что утверждение, согласно которому электрон обладает магнитным моментом определенного направления, означает, что электрон испытал столкновение с соответствующим образом приготовленным атомом ¹⁾.

Аналогично связанному электрону, свободный электрон полностью описывается волновой функцией $\psi(\vec{r}, s)$.

Если воздействующие на электрон силы столь малы, что направление спина остается постоянным в течение всего рассматриваемого опыта, то, как и прежде, эта функция может быть представлена в виде произведения

$$\psi(\vec{r}) \chi(s),$$

где $\psi(\vec{r})$ — решение уравнения Шредингера. В остальных случаях форма функции $\psi(\vec{r}, s)$ может быть определена на основании теории Дирака.

§ 3. Релятивистское волновое уравнение

Как известно, Дираку удалось показать, что нахождение волнового уравнения электрона, которое было бы инвариантно по отношению к преобразованию Лоренца и линейно по отношению к дифференцированию по времени, возможно только в предположении, что электрон обладает четвертой степенью свободы. С помощью подобного предположения, без каких бы то ни было дальнейших специальных допущений, можно получить значение магнитного момента атома водорода, совпадающее с экспериментально наблюдаемой величиной. Знакомство с элементами теории Дирака необходимо нам для дальнейшего анализа, и мы остановимся поэтому вкратце на основных ее положениях.

Согласно этой теории, электрон описывается четырьмя волновыми функциями

$$\psi_\lambda(x, y, z, t) \quad (\lambda = 1, 2, 3, 4).$$

¹⁾ Принципиальное разграничение между случаем свободного и связанного электрона, проводимое авторами, представляется мне неправильным. В обоих случаях направление электронного спина может быть установлено в принципе одинаковым образом, — вообще говоря, лишь статистически. При этом средняя или вероятная величина спина вместе с его направлением

определяется однозначно видом волновой функции $\psi(\vec{r}, s)$. Что касается о п ы т н о г о определения магнитного момента, то оно всегда предполагает воздействие на электрон некоторого внешнего магнитного поля, наличие которого, строго говоря, несовместимо с представлением о полной свободе электрона. Так напр. в однородном магнитном поле „свободный“ электрон описывает квантованное движение, напоминающее колебание гармонического осциллятора.

(Прим. ред.).

Вероятность нахождения электрона в элементе объема $d\tau$ в момент t определяется выражением

$$\sum_{\lambda=1}^4 |\psi_{\lambda}|^2 d\tau, \quad (9)$$

Четыре функции ψ_{λ} удовлетворяют одновременно дифференциальным уравнениям ¹⁾:

$$\left. \begin{aligned} (p_0 + mc) \psi_1 + (p_1 - ip_2) \psi_4 + p_3 \psi_3 &= 0 \\ (p_0 + mc) \psi_2 + (p_1 + ip_2) \psi_3 - p_3 \psi_4 &= 0 \\ (p_0 - mc) \psi_3 + (p_1 - ip_2) \psi_2 + p_3 \psi_1 &= 0 \\ (p_0 - mc) \psi_4 + (p_1 + ip_2) \psi_1 - p_3 \psi_2 &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

где

$$p_0 = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\epsilon V}{c},$$

$$p_1 = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\epsilon A_1}{c}, \text{ и т. д.}$$

V и \vec{A} — скалярный и векторный потенциалы. Покажем, что эти уравнения описывают поведение электрона, обладающего вышеописанными свойствами.

Заметим прежде всего, что для получения периодического решения p_0 должно быть заменено выражением $(W + \epsilon V)/c$, где W — энергия электрона. Если скорость электрона мала по сравнению со скоростью света, так что

$$W - mc^2 \ll W + mc^2,$$

то легко показать, что как ψ_3 , так и ψ_4 удовлетворяют уравнению Шредингера. Далее, если ψ является решением уравнения Шредингера, то приближенное решение ур-ний (10) имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= A\psi \\ \psi_4 &= B\psi \\ \psi_1 &= -\{B(p_1 - ip_2) + Ap_3\} \psi / 2mc \\ \psi_2 &= -\{A(p_1 + ip_2) - Bp_3\} \psi / 2mc, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

где A и B — произвольные постоянные, а p_1 , p_2 и p_3 — определенные выше операторы. Функции ψ_1 и ψ_2 при вышеуказанном условии значительно меньше, нежели ψ_3 и ψ_4 ; в выражении (9), определяющем плотность заряда, ими можно пренебречь. Если выражение (9) нормировано к единице и если мы хотим нормировать также наши четыре функции, мы должны иметь в этом приближении

$$AA^* + BB^* = 1.$$

¹⁾ Darwin, Proc. Roy. Soc. A. 118, 654, 1928.

Посмотрим теперь, будут ли решения ур-ний (10) описывать электрон, обладающий экспериментально наблюдаемыми спиновыми свойствами. Нормальное состояние атома водорода является, как известно, вырожденным; при наличии магнитного поля соответствующий энергетический уровень расщепляется на два уровня. Проверим, предсказывается ли это обстоятельство излагаемой нами теорией.

Так как постоянные A и B произвольны, мы сразу видим, что нормальное состояние вырождено. Для исследования поведения электрона в магнитном поле мы должны решить уравнения (10), описывающие его движение в поле ядра в присутствии магнитного поля H . Вырождение при этом устраняется. Если магнитное поле направлено по оси z , то одно из решений определяется выражением (11) при

$$A = 0, \quad B = 1.$$

Это решение соответствует энергии $W_0 - MH$; обозначим его через ψ_{λ}^I . Второе решение ψ_{λ}^{II} соответствует энергии $W_0 + MH$ и определяется выражением (11) при

$$A = 1, \quad B = 0.$$

Если магнитное поле не направлено по оси z , то решения уравнений могут быть найдены либо непосредственно, либо путем рассмотрения преобразования функций ψ при повороте осей ¹⁾. Если направление магнитного поля характеризуется полярными углами θ и φ , то решение с энергией $W_0 - MH$ определяется выражением (11) при

$$A = -\sin \frac{\theta}{2}, \quad B = e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2}.$$

Оно имеет, таким образом, вид

$$A\psi_{\lambda}^I + B\psi_{\lambda}^{II}.$$

Эта волновая функция описывает поведение атома с магнитным моментом, направление которого определяется углами θ и φ . Если бы атом был помещен в магнитное поле, направленное по оси z , то величина $|A|^2$ определяла бы вероятность того, что атом обладает энергией $+MH$, а $|B|^2$ — вероятностью того, что он обладает энергией $-MH$.

Мы показали, что для медленных электронов теория Дирака тождественна нерелятивистской трактовке Паули — Дарвина. Сравним обозначения обеих теорий. У Паули — Дарвина электрон, ось которого имеет направление \vec{l} (определяемое полярными углами θ и φ), описывается волновой функцией

$$\psi(x, y, z) \chi_l(s),$$

где ψ — обычное решение уравнения Шредингера; HMs — энергия, которой электрон обладал бы в магнитном поле H , направленном вдоль

¹⁾ Darwin, loc. cit.

оси z . Функция χ отлична от нуля лишь при условии $s = \pm 1$; следовательно:

$$\chi = e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \quad (s = -1)$$

$$\chi = -\sin \frac{\theta}{2} \quad (s = +1).$$

В обозначениях Дирака электрон описывается совокупностью волновых функций:

$$\psi_\lambda(x, y, z), \quad (\lambda = 1, 2, 3, 4)$$

ψ_1 и ψ_2 для медленных электронов очень малы; ψ_3 и ψ_4 пропорциональны ψ , при чем

$$\psi_3 = -\sin \frac{\theta}{2} \psi$$

$$\psi_4 = e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \psi.$$

Величина $|\psi_4|^2 dx dy dz$ определяет вероятность нахождения электрона в элементе объема $dx dy dz$ и вместе с тем вероятность того, что в магнитном поле он будет обладать энергией — MH .

То обстоятельство, что для медленных электронов каждая из функций ψ_3 и ψ_4 является приближенным решением уравнения Шредингера, доказывает сделанное нами в § 2 предположение, согласно которому электрон может быть испущен одним атомом и поглощен затем другим, не меняя при этом направления спина. Направление спина в общем случае почти не меняется, если только воздействующие на электрон силы не сообщают ему скорости, сравнимой со скоростью света.

§ 3. 1. Анализ уравнений при скоростях электронов, сравнимых со скоростью света. Точное решение ур-ний (10), характеризующих свободное движение электрона с импульсом (p_1, p_2, p_3) и энергией W , было дано Дарвином¹⁾; оно имеет следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= -\frac{Ap_3 + B(p_1 - ip_2)}{mc + W/c} S, & \psi_2 &= -\frac{A(p_1 + ip_2) - Bp_3}{mc + W/c} S \\ \psi_3 &= AS, & \psi_4 &= BS. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Функция S означает здесь $\exp\{2\pi i(p_1x + p_2y + p_3z - Wt)/h\}$, A и B — произвольные постоянные. Приходящееся на единицу объема число электронов определяется выражением:

$$(AA^* + BB^*) 2W / (W + mc^2).$$

Посмотрим теперь, как связаны постоянные A и B с направлением оси спина. Мы видели, что при $v/c \ll 1$ это направление определяется полярными углами θ и φ , где

$$-\frac{B}{A} = \operatorname{ctg} \frac{1}{2} \theta e^{i\varphi}. \quad (13)$$

¹⁾ loc. cit.

Для быстрых электронов мы должны, однако, выяснить, — что именно следует подразумевать под направлением оси спина, т. е. каким образом последнее могло бы быть определено.

Возможны два метода решения этой задачи; можно предположить, что „наблюдатель“ движется вместе с электроном, и определять направление спина электрона по отношению к его координатным осям; можно, однако, предположить, что электрон остановлен с помощью электрического поля, и определить направление оси спина для этого случая. Первый метод был рассмотрен Дарвином¹⁾, нашедшим, что ур-ние (13) определяет направление оси спина по отношению к движущемуся наблюдателю. Второй метод связан с экспериментальным определением спина; мы находим, что уравнение (13) определяет направление спина для электрона, приведенного в состояние покоя. Это можно выяснить на основании следующих соображений.

Ограничимся рассмотрением электрона, движущегося параллельно оси z , характеризующей направление электростатического поля. Ур-ния (10) сводятся к двум уравнениям относительно ψ_2 и ψ_4 и двум уравнениям относительно ψ_1 и ψ_3 . Исключая ψ_2 из первых двух уравнений, мы получаем:

$$\frac{2\pi i}{h} \left(\frac{W + eV}{c} - mc \right) \psi_4 - \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{h}{2\pi i} \left(\frac{W + eV}{c} + mc \right) \frac{\partial \psi_4}{\partial z} \right] = 0.$$

Функция ψ_3 удовлетворяет аналогичному уравнению. Так как ψ_3 и ψ_4 удовлетворяют одним и тем же граничным условиям, мы получаем:

$$\psi_3/\psi_4 = \text{const.}$$

С уменьшением скорости электрона отношение B/A не должно изменяться. Ур-ние (13) определяет, таким образом, направление оси спина для того случая, когда движущиеся электроны остановлены с помощью электрического поля.

§ 3. 2. Природа неполяризованного пучка. Медленным неполяризованным пучком мы будем называть такой, для которого электронные спины имеют всевозможные направления. Неполяризованный пучок не может быть охарактеризован с помощью одной волны; каждому электрону должна быть приведена в соответствие отдельная волновая функция.

„Быстрый“ неполяризованный пучок может быть получен из медленного пучка в результате ускорения его с помощью электрического поля. Из предыдущего параграфа следует, что наблюдателю, движущемуся вместе с электронами, такой пучок будет казаться неполяризованным.

Покажем теперь, что пучок, в котором половина электронов обладает спинами, направленными в одну сторону, а другая половина — спинами, направленными в противоположную сторону, будет вести себя подобно неполяризованному пучку. Предположим для определенности,

¹⁾ Darwin, Proc. Roy. Soc. A, 120, 628, 1928, § 5.

что пучок электронов, движущихся в направлении (l, m, n) , проходит через некоторое электромагнитное поле. Движение пучка будет описываться волновой функцией $\psi_\lambda(x, y, z) \exp\left(-\frac{2\pi i W t}{h}\right)$. Для электронов, еще не прошедших через поле, функции ψ_λ должны иметь форму плоских волн, распространяющихся в направлении (l, m, n) и поляризованных в некотором определенном направлении. Обозначим через (X, Y, Z) координаты некоторой точки пространства, в которую пучок попадает после прохождения через поле; величина

$$P = \sum_\lambda |\psi_\lambda(X, Y, Z)|^2$$

определяет вероятность нахождения электрона в этой точке. Покажем, что, усреднив P по всем начальным направлениям оси спина, мы получим точно такой же результат, как и при усреднении P по двум противоположным направлениям.

В последнем параграфе было показано, что плоская волна, для которой спин направлен по оси z , характеризуется функциями

$$\psi_3 = 0, \quad \psi_4 = S$$

и что для плоской волны, для которой спин направлен в противоположную сторону:

$$\psi_3 = S, \quad \psi_4 = 0.$$

Обозначим через $\psi_\lambda^I, \psi_\lambda^{II}$ волновые функции, имеющие подобный вид в части пространства, запятой падающей волной. В таком случае волновая функция, описывающая электрон, спин которого характеризовался вначале углами θ и φ , определяется выражением

$$-\sin \frac{\theta}{2} \psi_\lambda^I + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \psi_\lambda^{II}.$$

Мы получаем таким образом

$$P = \sin^2 \frac{\theta}{2} \sum_\lambda |\psi_\lambda^I|^2 + \cos^2 \frac{\theta}{2} \sum_\lambda |\psi_\lambda^{II}|^2 - \sum_\lambda \sin \theta \cos(\varphi + \alpha_\lambda) D_\lambda,$$

где

$$\psi_\lambda^{II} (\psi_\lambda^I)^* = D_\lambda e^{i\alpha_\lambda}.$$

Для противоположного направления, т. е. для направления, характеризующегося углами

$$\pi - \theta, \quad \pi + \varphi,$$

получаем

$$P = \cos^2 \frac{\theta}{2} \sum_\lambda |\psi_\lambda^I|^2 + \sin^2 \frac{\theta}{2} \sum_\lambda |\psi_\lambda^{II}|^2 + \sum_\lambda \sin \theta \cos(\varphi + \alpha_\lambda) D_\lambda.$$

Среднее значение этих двух выражений равно:

$$\frac{1}{2} \sum_\lambda [|\psi_\lambda^I|^2 + |\psi_\lambda^{II}|^2].$$

Точно такой же результат мы получим, усреднив P по всем значениям θ и φ .

§ 3. 3. Магнитный момент атома согласно уравнению Дирака. Покажем, что, согласно уравнению Дирака, в поле ядра с зарядом Ze и магнитном поле H , направленном по оси z , электрон в нормальном квантовом состоянии обладает энергией

$$W_0 \pm HM,$$

где W_0 — наименьшее значение энергии в отсутствии поля, а

$$M = \frac{e\hbar}{4\pi mc} \frac{1}{3} [1 + 2(1 - \gamma^2)^{\frac{1}{2}}] \quad (\gamma = 2\pi Ze^2/\hbar c).$$

Мы покажем в дальнейшем, что для атома, находящегося в состоянии с магнитной энергией $-HM$ (спин направлен по оси z), функция $\psi_3 = 0$.

Совокупность уравнений (10) может быть переписана в виде одного волнового уравнения:

$$\left[\frac{W + \varepsilon V}{c} + \sum_{t=1}^3 \alpha_t \left(p_t + \frac{eA_t}{c} \right) + \alpha_4 mc \right] \psi = 0,$$

где W — энергия, α_t и α_4 — известные дираковские матрицы¹⁾, $V = \frac{Ze}{r}$,

а A_t определяются выражениями

$$A_1 = -\frac{1}{2} Hy, \quad A_2 = \frac{1}{2} Hx, \quad A_3 = 0.$$

Мы можем, таким образом, записать

$$(W + \varepsilon V - U + c \sum \alpha_t p_t + \alpha_4 mc^2) \psi = 0,$$

где U — возмущающая энергия, обусловленная наличием магнитного поля:

$$U = -\varepsilon (\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2).$$

При $H = 0$ нормальное состояние (с наименьшей энергией) является вырожденным. Соответствующие этому случаю два решения обозначим через ψ^I и ψ^{II} . Полагая

$$f(r) = Ar^\beta e^{-r/a},$$

где

$$\beta = (1 - \gamma^2)^{1/2} - 1$$

¹⁾ См. Френкель Я. И., Волновая механика, ч. II, § 31. (Прим. ред.)

и выбирая A так, чтобы

$$4\pi \int_0^{\infty} |f(r)|^2 r^2 dr = 1,$$

получаем нормированные к единице решения ¹⁾:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1^I &= iNB \sin \theta e^{i\varphi} f \\ \psi_2^I &= -iNB \cos \theta f \\ \psi_3^I &= 0 \\ \psi_4^I &= -Nf \end{aligned} \right\} \quad (I)$$

и

$$\left. \begin{aligned} \psi_1^{II} &= -iNB \cos \theta f \\ \psi_2^{II} &= -iNB \sin \theta e^{i\varphi} f \\ \psi_3^{II} &= Nf \\ \psi_4^{II} &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (II)$$

где

$$B = \gamma [1 + (1 - \gamma^2)^{\frac{1}{2}}]^{-1}, \quad (B^2 + 1)N^2 = 1.$$

Легко показать, что

$$\int \tilde{\psi}^I \psi^{II} dx dy dz = 0,$$

где $\tilde{\psi}^I \psi^{II}$ обозначает сумму $\sum_{\lambda=1}^4 \psi_{\lambda}^{I*} \psi_{\lambda}^{II}$.

Для нахождения значений энергии в магнитном поле мы воспользуемся обычным методом теории возмущений. Если ΔW — изменение энергии, обусловленное наличием поля, то

$$\left| \begin{array}{cc} \Delta W - U^{I,I} & -U^{II,I} \\ -U^{I,II} & \Delta W - U^{II,II} \end{array} \right| = 0,$$

где

$$U^{I,II} = \int \tilde{\psi}^I U \psi^{II} dx dy dz, \text{ и т. д.}$$

Недиагональные элементы $U^{I,II}$, как легко видеть, обращаются в нуль; функции ψ^I и ψ^{II} представляют собой, таким образом, точные волновые функции нулевого порядка, а $U^{II,II}$ определяет изменение энергии атома, находящегося в состоянии, описываемом волновой функцией ψ^{II} .

Вычислим $U^{I,II}$. Мы имеем:

$$\tilde{\psi}^{II} \alpha_1 \psi^{II} = \tilde{\psi}_1 \psi_4 + \tilde{\psi}_2 \psi_3 + \tilde{\psi}_3 \psi_2 + \tilde{\psi}_4 \psi_1 = 2N^2 B \sin \theta \sin \varphi f^2.$$

¹⁾ Darwin, Proc. Roy. Soc., A., 118, 654, 1928.

Отсюда

$$\frac{1}{2} \varepsilon H y \tilde{\psi}^{II} \alpha_1 \psi^{II} = \varepsilon H N^2 B \sin^2 \theta \sin^2 \varphi r f^2.$$

Аналогичным образом находим, что

$$-\frac{1}{2} \varepsilon H x \tilde{\psi}^{II} \alpha_2 \psi^{II} = \varepsilon H N^2 B \sin^2 \theta \cos^2 \varphi r f^2$$

Сложив эти выражения и интегрируя по всему пространству, получаем:

$$U^{II,II} = \varepsilon H N^2 B \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{\infty} r^2 dr \sin^2 \theta r f^2$$

или же:

$$U^{II,II} = \frac{\varepsilon h H}{4\pi m c} \frac{1}{3} [1 + 2(1 - \gamma^2)^{\frac{1}{2}}].$$

Это выражение определяет изменение энергии атома в состоянии II, обусловленное наличием поля H . Аналогичным образом находим, что $U^{I,I}$ равняется такой же величине, взятой с обратным знаком.

При $\gamma \rightarrow 0$ множитель $\frac{1}{3} [2(1 - \gamma^2)^{\frac{1}{2}} + 1]$ стремится к 1. Для урана он равен 0,83.

§ 4. Рассеяние быстрых электронов и уравнение Дирака ¹⁾

Попробуем теперь видоизменить изложенные в главах II и III методы с целью рассмотрения рассеяния быстрых электронов, поведение которых описывается уравнением Дирака.

Ур-ния (10) могут быть записаны в виде:

$$\left[p_0 + \frac{\varepsilon V}{c} + \frac{h}{2\pi i} \rho_1 \vec{\sigma} \cdot \text{grad} + \rho_3 m c \right] \psi = 0, \quad (14)$$

где $\vec{\sigma}$ — векторная матрица с составляющими:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

а ρ_1 и ρ_3 — матрицы:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

¹⁾ Mott, Proc. Roy. Soc. 135, 429, 1932.

причем волновая функция ψ имеет четыре составляющие: $\psi_1 \dots \psi_4$. Мы будем искать решение, имеющее асимптотическую форму:

$$\psi_\lambda = a_\lambda e^{2\pi i p z / h} + r^{-1} e^{2\pi i p r} u_\lambda(\theta, \varphi). \quad (\lambda = 1, 2, 3, 4). \quad (15)$$

Дифференциальное сечение для рассеяния определится при этом выражением:

$$I(\theta) d\omega = \frac{\sum |u_\lambda(\theta, \varphi)|^2}{\sum |a_\lambda|^2} d\omega. \quad (16)$$

Это сечение соответствует определенному направлению спиновых осей падающих электронов. На практике мы имеем дело с рассеянием неполяризованных пучков, так что выражение (16) должно быть усреднено по всем начальным направлениям оси спина. В § 3. 2 было показано, что для этого достаточно взять среднее значение выражений, полученных для электронов, начальные спины которых параллельны и антипараллельны оси z . Мы ограничимся поэтому лишь рассмотрением этих двух случаев. Для рассмотрения общего случая (представляющего, например, интерес при учете изменения направления спиновой оси в результате столкновений или же при рассмотрении поляризационных эффектов) мы должны были бы взять линейную комбинацию этих двух основных решений.

Для плоской волны, распространяющейся вдоль оси z , имеем:

$$\frac{a_1}{a_3} = \frac{p}{p_0 + mc} = \frac{a_2}{a_4},$$

так что только две из величин a_λ оказываются произвольными. Рассеянную сферическую волну можно рассматривать как состоящую из плоских волн той же длины, что и падающая волна, но распространяющихся в различных направлениях. Для любой из этих волн отношения $\frac{\psi_1}{\psi_3}$

и $\frac{\psi_2}{\psi_4}$ совпадают с соответствующими отношениями для падающей волны. Для плоской волны $e^{2\pi i p z' / h}$, распространяющейся в направлении (θ, φ) , мы имеем, таким образом:

$$\psi_1 = \frac{-A'p}{mc + p_0} e^{2\pi i p z' / h}, \quad \psi_2 = \frac{B'p}{mc + p_0} e^{2\pi i p z' / h},$$

$$\psi_3 = A' e^{2\pi i p z' / h}, \quad \psi_4 = B' e^{2\pi i p z' / h},$$

где A' и B' зависят только от направления спиновой оси, причем

$$-\frac{B'}{A'} = \operatorname{ctg} \frac{1}{2} \chi e^{i\omega},$$

где (χ, ω) — полярные углы между этим направлением и направлением (θ, φ) . Отсюда следует, что

$$\frac{\sum |u_\lambda(\theta, \varphi)|^2 d\omega}{\sum |a_\lambda|^2} = \frac{|u_3(\theta, \varphi)|^2 + |u_4(\theta, \varphi)|^2}{|a_3|^2 + |a_4|^2} d\omega. \quad (17)$$

Мы можем, таким образом, ограничиться рассмотрением ψ_3 и ψ_4 .

В случае электронов со спином, параллельным или антипараллельным оси z , мы будем искать, соответственно, решения, имеющие асимптотический вид:

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &\sim e^{2\pi i p z} + r^{-1} e^{2\pi i p r} f_1(\theta, \varphi) \\ \psi_4 &\sim r^{-1} e^{2\pi i p r} g_1(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} (A)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &\sim r^{-1} e^{2\pi i p r} f_2(\theta, \varphi) \\ \psi_4 &\sim e^{2\pi i p z} + r^{-1} e^{2\pi i p r} g_2(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} (B)$$

Для нахождения этих решений мы попытаемся решить уравнение (14) с помощью разложения по шаровым функциям. Дарвином¹⁾ были введены в рассмотрение решения, путем линейной комбинации которых могут быть получены искомые ряды. Группа таких решений, содержащих шаровые функции n -го порядка, определяется формулами

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= (n+1) G_n P_n(\cos \theta) & \psi_4 &= -G_n P_n'(\cos \theta) e^{i\varphi} \\ \psi_3 &= n G_{-n-1} P_n(\cos \theta) & \psi_4 &= G_{-n-1} P_n'(\cos \theta) e^{i\varphi} \end{aligned} \right\} (\alpha)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= G_n P_n'(\cos \theta) e^{i\varphi} & \psi_4 &= (n+1) G_n P_n(\cos \theta) \\ \psi_3 &= -G_{-n-1} P_n'(\cos \theta) e^{i\varphi} & \psi_4 &= n G_{-n-1} P_n(\cos \theta) \end{aligned} \right\} (\beta),$$

где G_n — надлежащее решение уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{2\pi}{h} \left(p_0 - \frac{\varepsilon V}{c} + mc \right) F_n + \frac{dG_n}{dr} - \frac{n}{r} G_n &= 0, \\ -\frac{2\pi}{h} \left(p_0 - \frac{\varepsilon V}{c} - mc \right) G_n + \frac{dF_n}{dr} + \frac{n+2}{r} F_n &= 0. \end{aligned} \right\} (19)$$

G_{-n-1} получим, заменив в уравнениях (19) n на $-n-1$. Так как G_n имеет асимптотический вид:

$$G_n \sim r^{-1} \cos(2\pi p r / h + \eta_n), \quad (20)$$

мы можем построить решения вида (18) точно таким же способом, как в главе II, где нами были получены решения аналогичного вида. Воспользовавшись основными решениями (α) , получаем решение типа (18A):

$$\left. \begin{aligned} \psi_3 &= i \sum_{n=0}^{\infty} [(n+1) \exp i \eta_n G_n + n \exp i \eta_{-n-1} G_{-n-1}] P_n(\cos \theta), \\ \psi_4 &= i \sum_{n=0}^{\infty} [-\exp i \eta_n G_n + \exp i \eta_{-n-1} G_{-n-1}] P_n'(\cos \theta) e^{i\varphi}, \end{aligned} \right\} (21)$$

¹⁾ Darwin, Proc. Roy. Soc. A, 118, 654, 1928.

откуда

$$f_1(\theta, \varphi) = \frac{i\hbar}{4\pi p} \sum_{n=0}^{\infty} [(n+1) \{ \exp(2i\eta_n + ni\pi) + 1 \} + n \{ \exp(2i\eta_{n-1} + ni\pi) + 1 \}] P_n(\cos \theta),$$

$$g_1(\theta, \varphi) = \frac{i\hbar}{4\pi p} \sum_{n=0}^{\infty} [- \{ \exp(2i\eta_n + ni\pi) - 1 \} + \{ \exp(2i\eta_{n-1} + ni\pi) - 1 \}] P'_n(\cos \theta) e^{i\varphi}. \quad (22)$$

Точно таким же образом с помощью основных решений (β) мы можем построить решения вида (18B). При этом

$$\left. \begin{aligned} f_1(\theta, \varphi) = f_2(\theta, \varphi) = f(\theta), \\ g_1(\theta, \varphi) = g(\theta) e^{i\varphi}, \quad g_2(\theta, \varphi) = g(\theta) e^{-i\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

В общем случае, когда падающая волна имеет вид:

$$\psi_3 = Ae^{2\pi ipz}, \quad \psi_4 = Be^{2\pi ipz},$$

компоненты функции, характеризующей рассеянную волну, будут соответственно:

$$\left. \begin{aligned} u_3(\theta, \varphi) = Af - Bge^{i\varphi}, \\ u_4(\theta, \varphi) = Bf + Age^{i\varphi}, \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

причем

$$|u_3|^2 + |u_4|^2 = (|A|^2 + |B|^2) (|f|^2 + |g|^2) + (fg^* - gf^*) (-AB^*e^{i\varphi} + A^*Be^{-i\varphi}). \quad (25)$$

§ 4. 1. Поляризации. Естественно попытаться обнаружить поляризационные или селективные спиновые эффекты, обусловленные рассеянием, путем осуществления опытов с двойным рассеянием, при которых рассеянный пучок, движущийся в определенном направлении, подвергается вторичному рассеянию. Селективный спиновый эффект должен был бы при этом привести к асимметрии интенсивности вторичного рассеяния по отношению к направлению первичного рассеяния. Предположим, что пучок электронов LT_1 падает на пластинку T_1 (рис. 7). Электроны, рассеянные на угол θ_1 в плоскости чертежа, попадают затем на вторую пластинку T_2 . При этом наблюдается рассеяние от T_2 на угол θ_2 и если пучок T_1T_2 в какой-либо степени поляризован, это рассеяние не будет симметричным по отношению к направлению T_1T_2 . Для исследования этого обстоятельства с помощью наших формул (22) и (25), рассмотрим неполяризованный пучок электронов, падающий на T_1 . Мы будем описывать его с помощью двух пучков равной интенсивности, спиновые оси которых соответственно параллельны и антипараллельны направлению падения, и будем рас-

смаивать двойное рассеяние этих двух пучков в отдельности. При этом

$$\begin{array}{ll} \text{I.} & \text{II.} \\ \psi_3 = Ae^{2\pi ipz/h}, \quad \psi_4 = 0 & \psi_3 = 0, \quad \psi_4 = Be^{2\pi ipz/h} \\ AA^* = \frac{1}{2} & BB^* = \frac{1}{2}. \end{array}$$

В случае I, согласно формулам (18) и (23), направление спиновой оси рассеянного пучка T_1T_2 определяется соотношением:

$$-\frac{\psi_4}{\psi_3} = \frac{g(\theta_1) e^{-i\varphi_1}}{f(\theta_1)} = \text{ctg} \frac{1}{2} \chi e^{i\omega} \quad (26)$$

и может быть рассматриваемо как обусловленное двумя пучками, интенсивности которых:

$$\frac{|f(\theta_1)|^2}{|f(\theta_1)|^2 + |g(\theta_1)|^2}$$

и

$$\frac{|g(\theta_1)|^2}{|f(\theta_1)|^2 + |g(\theta_1)|^2}.$$

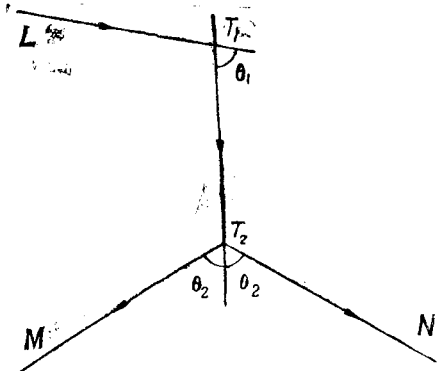


Рис. 7.

Повернем теперь наши оси таким образом, чтобы направление T_1T_2 совпало с осью z . В таком случае волновые функции для рассеянного пучка могут быть записаны в следующем виде (см. § 3.2):

$$\psi_3 = A_1 e^{2\pi ipz/h}, \quad \psi_4 = B_1 e^{2\pi ipz/h},$$

где

$$\begin{aligned} A_1 &= A \left\{ f(\theta_1) \cos \frac{1}{2} \theta_1 + g(\theta_1) \sin \frac{1}{2} \theta_1 \right\}, \\ B_1 &= A \left\{ g(\theta_1) \cos \frac{1}{2} \theta_1 - f(\theta_1) \sin \frac{1}{2} \theta_1 \right\} \end{aligned} \quad (27)$$

Для нахождения интенсивности пучка, рассеянного от пластинки на угол θ_2 , мы можем воспользоваться формулой (25), заменив A и B через A_1 и B_1 . Это дает для вторичного рассеяния:

$$\begin{aligned} |u_3|^2 + |u_4|^2 &= \frac{1}{2} \{ |f(\theta_1)|^2 + |g(\theta_1)|^2 \} \{ |f(\theta_2)|^2 + |g(\theta_2)|^2 \} + \\ &+ \{ f(\theta_2) g^*(\theta_2) - g(\theta_2) f^*(\theta_2) \} \left\{ 2(|f(\theta_1)|^2 - |g(\theta_1)|^2) \sin \theta_1 \sin \varphi_2 + \right. \\ &+ g(\theta_1) f^*(\theta_1) \left(\sin^2 \frac{1}{2} \theta_1 e^{i\varphi_2} + \cos^2 \frac{1}{2} \theta_1 e^{-i\varphi_2} \right) - \\ &\left. - f(\theta_1) g^*(\theta_1) \left(\cos^2 \frac{1}{2} \theta_1 e^{i\varphi_2} + \sin^2 \frac{1}{2} \theta_1 e^{-i\varphi_2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (28)$$

Аналогично для нахождения интенсивности двойного рассеяния пучка, спин которого был первоначально антипараллелен LT_1 , мы должны воспользоваться формулой (25), полагая:

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= B \left\{ -g(\theta_1) \cos \frac{1}{2} \theta_1 + f(\theta_1) \sin \frac{1}{2} \theta_1 \right\}, \\ B_1 &= B \left\{ f(\theta_1) \cos \frac{1}{2} \theta_1 + g(\theta_1) \sin \frac{1}{2} \theta_1 \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

Складывая эти значения интенсивностей и принимая во внимание соотношение: $AA^* = BB^* = \frac{1}{2}$, мы приходим к заключению, что число электронов, рассеянных от второй пластинки в направлении θ_2, φ_2 , пропорционально выражению:

$$\{ |f(\theta_1)|^2 + |g(\theta_1)|^2 \} \{ |f(\theta_2)|^2 + |g(\theta_2)|^2 + 2D(\theta_1)D(\theta_2) \cos \varphi_2 \}, \quad (30)$$

где

$$D(\theta) = i(fg^* - gf^*).$$

При данных значениях θ_1 и θ_2 и переменном φ_2 интенсивность рассеяния пропорциональна величине:

$$1 + \delta \cos \varphi_2,$$

где

$$\delta = \frac{2D(\theta_1)D(\theta_2)}{\{ |f(\theta_1)|^2 + |g(\theta_1)|^2 \} \{ |f(\theta_2)|^2 + |g(\theta_2)|^2 \}}, \quad (31)$$

и не симметрична относительно направления T_1T_2 . Однако, асимметрия имеет место в плоскости LT_1T_2 , а не в перпендикулярной плоскости. Таким образом, при $\theta_1 = \theta_2$ рассеяние оказывается максимальным вдоль направления T_2M . При $D(\theta) = 0$ асимметрия места не имеет; это не означает, однако, что направление спина при рассеянии остается неизменным, а показывает лишь, что его изменение не зависит от начального направления.

§ 4. 2. Рассеяние кулоновым полем. Простейший тип двойного рассеяния—при котором рассеивающими центрами являются атомные ядра, так что в ур-ниях (14) можно положить:

$$V = -\frac{Ze^2}{r}.$$

При рассмотрении этого случая мы встречаемся с той же трудностью, с которой мы имели дело при изучении рассеяния Кулоновым полем для нерелятивистского случая (см. главу III). Асимптотическая форма решения G_n ур-ний (19) при $V = -\frac{Ze^2}{r}$ имеет вид:

$$G_n \sim r^{-1} \cos \left\{ 2\pi pr/h + \frac{2\pi Ze^2}{hv} \lg \frac{4\pi pr}{h} + \eta_n \right\}. \quad (32)$$

Наличие логарифмического члена в этом выражении очень мало изменяет его по отношению к выражению (20); разница заключается только в том, что падающая волна не является вполне плоской, так же как и в нерелятивистском случае; мы будем поэтому пользоваться прежними методами.

Уравнения, с помощью которых могут быть определены величины G_{-n-1} имеют вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{2\pi}{h} \left(\frac{W}{c} + \frac{Ze^2}{r} + mc \right) F_{-n-1} + \frac{dG_{-n-1}}{dr} + \frac{n+1}{r} G_{-n-1} &= 0, \\ -\frac{2\pi}{h} \left(\frac{W}{c} + \frac{Ze^2}{r} - mc \right) G_{-n-1} + \frac{dF_{-n-1}}{dr} - \frac{n-1}{r} F_{-n-1} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

Полагая

$$F_{-n-1} = \left(1 - \frac{W}{mc^2} \right)^{1/2} (\sigma_1 - \sigma_2) r^{-1},$$

$$G_{-n-1} = \left(1 + \frac{W}{mc^2} \right)^{1/2} (\sigma_1 + \sigma_2) r^{-1},$$

$$\alpha = \frac{2\pi Ze^2}{hc}, \quad \gamma = \frac{2\pi Ze^2}{hv}, \quad \gamma' = \frac{2\pi Ze^2}{hv} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{1/2}, \quad \rho = \sqrt{n^2 - \alpha^2}, \quad k = \frac{2\pi p}{h},$$

имеем

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\sigma_1}{dr} &= \left(ik - \frac{i\gamma}{r} \right) \sigma_1 - \left(n + \frac{i\gamma'}{r} \right) \frac{\sigma_2}{r}, \\ \frac{d\sigma_2}{dr} &= - \left(n - \frac{i\gamma'}{r} \right) \frac{\sigma_1}{r} - \left(ik - \frac{i\gamma}{r} \right) \sigma_2. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Для решения этих уравнений положим:

$$\sigma_1 = e^{-ikr} r^s \sum a_\nu r^\nu, \quad \sigma_2 = e^{-ikr} r^s \sum b_\nu r^\nu$$

и определим величины s, a_ν и b_ν обычным образом. В результате находим:

$$\sigma_1 = a_0 e^{-ikr} r^s F(i\gamma + \rho + 1, 2\rho + 1, 2ikr),$$

$$\sigma_2 = b_0 e^{-ikr} r^s F(i\gamma + \rho, 2\rho + 1, 2ikr),$$

$$\frac{a_0}{b_0} = -\frac{i\gamma + \rho}{i\gamma' + n}, \quad (35)$$

так что:

$$G_{-n-1} = N_n \left[\frac{c_n \xi_n \exp\left(-\frac{1}{2} \pi i \rho\right)}{\Gamma(\rho + 1 + i\gamma)} + \frac{c_n' \xi_n' \exp\left(\frac{1}{2} \pi i \rho\right)}{\Gamma(\rho + 1 - i\gamma)} \right], \quad (36)$$

где

$$\xi_n = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(\rho + 1 + i\gamma)}{\Gamma(2\rho + 1)} (2ikr)^\rho e^{-ikr} r^{-1} \exp\left(\frac{1}{2} \pi\gamma + \frac{1}{2} \pi i\rho\right) F(\rho + 1 + i\gamma; 2\rho + 1; 2ikr),$$

$$\xi_n' = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(\rho + 1 - i\gamma)}{\Gamma(2\rho + 1)} (2ikr)^\rho e^{-ikr} r^{-1} \exp\left(\frac{1}{2} \pi\gamma - \frac{1}{2} \pi i\rho\right) F(\rho + i\gamma; 2\rho + 1; 2ikr),$$

$$c_n/c_n' = -(n - i\gamma')/\rho - i\gamma,$$

а N_n — нормирующий множитель [$N_n = |\Gamma(\rho + 1 - i\gamma)| / (c_n c_n')^{1/2}$].

Воспользовавшись асимптотическими разложениями гипергеометрических функций (глава II, § 2), имеем:

$$G_{-n-1} \sim (kr)^{-1} \cos(kr + \gamma \lg 2kr + \eta_{-n-1}), \quad (37)$$

где

$$e^{2i\eta_{-n-1}} = \frac{n - i\gamma'}{\rho_n - i\gamma} \frac{\Gamma(\rho_n + 1 - i\gamma)}{\Gamma(\rho_n + 1 + i\gamma)} = B_n. \quad (38)$$

Для описания падающей волны мы воспользуемся методами и результатами главы III и построим ряды:

$$\begin{aligned} & i \sum (2n+1) \xi_n'(r) (-1)^n P_n(\cos \theta) \sim \\ & \sim \exp\left\{ikr \cos \theta - i\gamma \lg 2kr \sin^2 \frac{1}{2} \theta\right\}. \end{aligned} \quad (39)$$

Эти ряды описывают падающую волну I , не являющуюся вполне плоской. Полагая:

$$\begin{aligned} \psi_3 &= i \sum [(2n+1) \xi_n' + (nB_n + (n+1) B_{-n-1}) \xi_n] (-1)^n P_n(\cos \theta) \\ \psi_4 &= i \sum [B_n - B_{-n-1}] \xi_n (-1)^n P_n'(\cos \theta) e^{i\varphi}, \end{aligned} \quad (40)$$

получаем асимптотическую форму решений в виде:

$$\psi_3 \sim I + Sf(\theta), \quad \psi_4 \sim Sg(\theta) e^{i\varphi}, \quad (41)$$

где $S = n^{-1} e^{ikr + i\gamma \lg 2kr}$ представляет радиальный множитель функции, описывающей рассеянную волну, а угловые множители имеют вид:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2} i \sum [nB_n + (n+1) B_{-n-1}] (-1)^n P_n(\cos \theta), \\ g(\theta) &= \frac{1}{2} i \sum [B_n - B_{-n-1}] (-1)^n P_n'(\cos \theta). \end{aligned} \quad (42)$$

Интенсивность рассеяния определяется с помощью этих функций, которыми следует пользоваться точно таким же образом, как и соответствующими функциями, рассмотренными в предыдущем параграфе.

В отличие от нерелятивистского случая, ряды (42) не могут быть просуммированы с помощью известных функций; однако мы можем получить приближенные выражения для $f(\theta)$ и $g(\theta)$, где $\alpha = \frac{2\pi Z e^2}{hc}$ и γ малые числа, разлагая коэффициенты рядов в ряд по степеням α . Заметим прежде всего, что при $\gamma = \gamma'$ и $\alpha^2 = 0$:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{1}{2} i \sum (2n+1) \frac{\Gamma(n+1-i\gamma)}{\Gamma(n+1+i\gamma)} P_n(\cos \theta), \\ g(\theta) &= 0. \end{aligned} \quad (43)$$

Это приводит к нерелятивистскому выражению для $f(\theta)$, полученному нами в § 2 главы III:

$$f(\theta) = \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} \frac{1}{2} \exp\left[2ik \lg \sin \frac{\theta}{2} + \frac{\Gamma(1-i\gamma)}{\Gamma(1+i\gamma)} + i\pi\right] = R. \quad (44)$$

Мы можем воспользоваться этим выражением следующим образом. Полагая:

$$\begin{aligned} C_n &= -e^{-i\pi\gamma} \Gamma(\rho - i\gamma) / \Gamma(1 + \rho + i\gamma), \\ F(\theta) &= \frac{1}{2} i \sum_0^\infty (-1)^n \{nC_n + (n+1) C_{n+1}\} P_n(\cos \theta), \\ G(\theta) &= \frac{1}{2} i \sum_0^\infty (-1)^n \{nC_n - (n+1) C_{n+1}\} P_n(\cos \theta), \end{aligned} \quad (45)$$

получаем:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -i\gamma' F + G, \\ g(\theta) &= [i\gamma' (1 + \cos \theta) F + (1 - \cos \theta) G] / \sin \theta, \end{aligned} \quad (46)$$

где F и G — функции от θ , α^2 и γ , не зависящие от γ' . Мы можем разложить их в ряд по степеням α^2 :

$$F = F_0 + F_1 \alpha^2 + \dots; \quad G = G_0 + G_1 \alpha^2 + \dots$$

Пренебрегая членами порядка α^3 , получаем:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -i\gamma' F_0 + G_0 + G_1 \alpha^2, \\ \sin \theta g(\theta) &= i\gamma' (1 + \cos \theta) F_0 + (1 - \cos \theta) (G_0 + G_1 \alpha^2). \end{aligned} \quad (47)$$

Так как F_0 и G_0 не зависят от α^2 и γ' , а $f(\theta)$ и $g(\theta)$ имеют вид (43), при $\alpha = 0$ и $\gamma = \gamma'$ имеем:

$$\begin{aligned} i\gamma' F_0 &= -R, \\ G_0 &= R \operatorname{ctg}^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (48)$$

и [так как $C_n = \frac{(-1)^n \Gamma(n - i\gamma)}{\Gamma(1 + n + i\gamma)} + \frac{\alpha^2}{2n^2} (-1)^n \left(i\pi + \frac{1}{n} \right) + \dots$]

$$G_1(\theta) = \alpha^2 \left\{ \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{\infty} P_n(\cos \theta) - \frac{i}{4} \sum_{n=1}^{\infty} [n^{-1} + (n+1)^{-1}] P_n(\cos \theta) \right\}.$$

Далее

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_n(\cos \theta) = \frac{1}{2} \operatorname{cosec} \frac{\theta}{2}; \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{P_n(\cos \theta)}{n+1} = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1 - 2x \cos \theta + x^2}} = \lg \left(1 + \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} \right);$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{P_n(\cos \theta)}{n} = \int_0^1 \left(\frac{1}{x \sqrt{1 - 2x \cos \theta + x^2}} - \frac{1}{x} \right) dx = \lg \frac{\operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2}}{1 + \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2}},$$

так что:

$$G_1 = \frac{1}{4} \left[\pi \operatorname{cosec} \frac{\theta}{2} - i \lg \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} \right]. \quad (49)$$

Подставляя значения α , γ , γ' , мы получаем таким образом:

$$\begin{aligned} |f|^2 + |g|^2 &= \\ &= \frac{Z^2 \epsilon^4}{4 m^2 v^4} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \left[\operatorname{cosec}^4 \frac{\theta}{2} - \frac{v^2}{c^2} \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} + \text{члены порядка } \alpha \right], \\ fg^* - gf^* &= \frac{Z^2 \epsilon^4}{4 m^2 v^4} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{3/2} \frac{v}{c} 4 i \alpha \operatorname{cosec} \theta \lg \operatorname{cosec} \frac{\theta}{2}. \quad (50) \end{aligned}$$

Это приближение справедливо только в случае быстрых электронов и легких ядер; оно дает при этом лишь слабый поляризационный эффект, так как отношение f к g не существенно. Влияние релятивистских и спиновых эффектов на интенсивность рассеяния мало. Наибольший интерес представляет таким образом рассмотрение поляризации. Возвращаясь к рис. 7 и полагая $\theta_1 = \theta_2 = 90^\circ$, имеем:

$$\delta = \alpha^2 \frac{\left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \frac{v^2}{c^2}}{\left(2 - \frac{v^2}{c^2} \right)^2}.$$

Максимальное значение этого выражения:

$$\delta = 0,2 \left(\frac{Z}{137} \right)^2 \quad (51)$$

получается при $\frac{v}{c} = 0,81$. Эта величина чересчур мала, чтобы быть обнаруженной в случае легких ядер ($Z \ll 137$); однако, хотя эта формула и неприменима к тяжелым ядрам, можно думать, что в случае последних поляризация достаточно велика, чтобы быть наблюдаемой. Это предположение было подтверждено Моттом, вычислившим ряды (42) для случая рассеяния ядрами золота и найдшим максимальную поляризацию в 16% при $\frac{v}{c} = 0,6$.

Изменение асимметрии (в единицах 200 δ) иллюстрируется на рис. 8. Зависимость интенсивности рассеяния от энергии электронов при 90° характеризуется выражением:

$$I(\theta) = \left(\frac{Z e^2}{2 m v^2} \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} \right)^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) R,$$

где R приведено на рис. 9.

Эта теория не находится, однако, в согласии с опытными данными. В действительности поляризация чрезвычайно мала, и хотя некоторыми исследователями были как будто получены положительные результаты, наблюдаемая ими асимметрия может быть, однако, объяснена другими способами. Весьма сомнительно, чтобы экранирование могло играть большую роль; Мотт показал также, что радиационные силы очень малы. Зависимость $I(\theta)$ от v должна была бы, однако, согласоваться с опытными данными. Мы вынуждены, таким образом, констатировать, что теория этого вопроса находится пока в неудовлетворительном состоянии.

5. Решения уравнений Дирака, соответствующие отрицательной энергии. Положительный электрон.

Решение уравнений Дирака (10) было записано нами в форме:

$$\psi = a_\lambda \exp \frac{2\pi i}{h} (p_1 x + p_2 y + p_3 z - Wt),$$

где

$$p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = \frac{W^2}{c^2} - m^2 c^2. \quad (52)$$

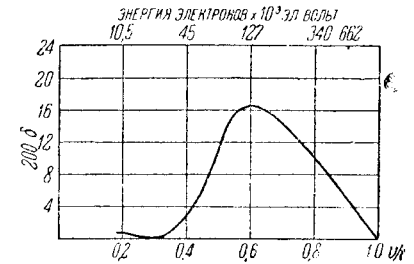


Рис. 8.

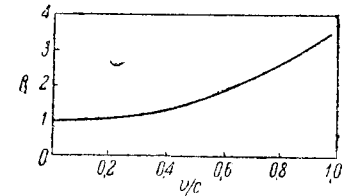


Рис. 9.

Это решение соответствует положительным значениям W ; мы можем однако получить также решения вида:

$$\psi = b_\lambda \exp \frac{2\pi i}{h} (p_1 x + p_2 y + p_3 z + Wt),$$

причем соотношения (52) удовлетворяются, но W имеет отрицательное значение. В соответствии с ур-нием (12) получаем:

$$b_1 = C, \quad b_2 = D, \quad b_3 = \frac{Cp_3 + D(p_1 - ip_2)}{mc + \frac{W}{c}}, \quad b_4 = \frac{C(p_1 + ip_2) - Dp_3}{mc + \frac{W}{c}}. \quad (53)$$

Эти решения соответствуют состояниям, в которых электрон обладает отрицательной кинетической энергией, что представляет серьезную трудность при трактовке уравнений Дирака. Исключить эти состояния из рассмотрения невозможно, так как учет их необходим при применении теории возмущений к релятивистским задачам; имеется конечная вероятность переходов между состояниями с положительной и отрицательной кинетической энергией. В связи с особыми свойствами, которыми должны были бы обладать электроны с отрицательной кинетической энергией или отрицательной массой, обнаружение подобных частиц не должно было бы представлять затруднений; однако, до сих пор они обнаружены не были, откуда следует, что решения типа (53) не имеют непосредственного физического смысла и характеризуют лишь промежуточные состояния, встречающиеся при рассмотрении задач теории возмущений. В 1930 году Дираком¹⁾ было предложено решение этой дилеммы: он предположил, что все возможные состояния с отрицательной кинетической энергией заполнены (по крайней мере в нашем пространственно-временном многообразии), так что, согласно принципу Паули, переходы в такие состояния из состояний с положительной энергией не могут иметь места. При таких обстоятельствах равномерно распределенные электроны с отрицательной кинетической энергией не будут обуславливать каких-либо экспериментально наблюдаемых эффектов, за исключением того случая, когда в распределении имеется незанятое состояние или „дырка“. Такая „дырка“ будет вести себя как частица, обладающая положительным зарядом и положительной массой. Дирак предположил вначале, что эти „дырки“ представляли собой протоны. Несколько позднее Вейль показал, что масса „дырки“ должна в точности равняться массе электрона, а Оппенгеймер²⁾ доказал, что время жизни „дырки“ должно быть очень мало. Вопрос о природе „дырок“ оставался неясным до тех пор, пока Андерсон³⁾ в Америке, а Блекетт и Оккиалини⁴⁾ в Англии не заметили в ионизационной камере следов, принадлежавших положительным электронам, как это следовало из характера их траектории в магнитном поле и характера ионизации, наблюдавшейся вдоль их пути. Эти

1) Dirac, Proc. Roy. Soc. A, 133, 60, 1931.

2) Oppenheimer, Phys. Rev. 35, 939, 1930.

3) Anderson, Phys. Rev. 41, 405, 1932; 44, 406, 1933.

4) Blackett und Occhialini, Proc. Roy. Soc. A, 139, 699, 1933.

частицы были отождествлены с „дырками“ теории Дирака; в главе XV нами будет рассмотрен вопрос о вероятности переходов, связанных с положительными и отрицательными электронами. Переход электрона из одного из равномерно заполненных состояний с отрицательной кинетической энергией в состояние с положительной кинетической энергией, могущее, например, иметь место в результате воздействия электрона или светового кванта, приводит к образованию „пары“ отрицательно и положительно заряженных электронов, причем первый представляет собой возбужденный электрон, а второй—дырку, остающуюся в равномерном распределении состояний с отрицательной энергией. В главе XV мы вернемся к подробному рассмотрению этого вопроса; здесь мы приведем лишь волновые функции, характеризующие движение электрона, обладающего отрицательной кинетической энергией, в кулоновом поле сил, потенциал которого равен $-\frac{Ze^2}{r}$. Соответственно решениям (35), для состояний с отрицательной кинетической энергией $-W + mc^2$ имеем:

$$F_{-n-1} = \left(1 + \frac{W}{mc^2}\right)^{1/2} (\sigma_1 - \sigma_2) r^{-1},$$

$$G_{-n-1} = \left(1 - \frac{W}{mc^2}\right)^{1/2} (\sigma_1 - \sigma_2) r^{-1}, \quad (54)$$

где

$$\sigma_1 = a_0 e^{-ikr} r^\rho I'(i\gamma + \rho + 1, 2\rho + 1, 2ikr)$$

$$\sigma_2 = b_0 e^{-ikr} r^\rho I'(i\gamma + \rho, 2\rho + 1, 2ikr)$$

$$\frac{a_0}{b_0} = -\frac{i\gamma + \rho}{i\gamma' + n}, \quad \alpha = \frac{2\pi Ze^2}{hc}, \quad \gamma = \frac{-\alpha W}{(W^2 - m^2 c^4)^{1/2}},$$

$$\rho = \sqrt{n^2 - \alpha^2}, \quad \gamma' = \frac{mc^2 \alpha}{(W^2 - m^2 c^4)^{1/2}}. \quad (55)$$

§ 6. Приближенные решения уравнений Дирака для быстрых электронов

Из приведенных в § 4.2 соображений ясно, что в случае кулонова поля точных решений уравнений Дирака, соответствующих решению (9) главы III для нерелятивистских уравнений (полученному Гордоном), не существует. Это приводит к большим затруднениям при вычислении вероятностей переходов для процессов, относящихся к большим значениям энергии и состояниям непрерывного спектра. Ряды, расположенные по ядровым функциям, сходятся очень медленно, и так как каждый из членов в разложении матрицы перехода представляет собой обычно очень сложное выражение, вычисления представляют значительные трудности. В некоторых случаях они могут быть упрощены путем введения в рассмотрение волновых функций, описывающих плоские волны; во многих случаях такое приближение оказывается,

однако, чересчур грубым. Весьма желательно, в связи с этим, найти функции, дающие лучшее приближение. Группа таких функций, соответствующих положительным и отрицательным направлениям спина, была дана Ферри¹⁾:

I. С п и н ↑

$$\psi_1 = -N \left\{ kf - \frac{i\alpha}{2} \left(mc + \frac{W}{c} \right) (1 - \cos \theta) f' \right\}$$

$$\psi_2 = -N \frac{i\alpha}{2} \left(mc + \frac{W}{c} \right) \sin \theta e^{i\varphi} f'$$

$$\psi_3 = N \left\{ \left(mc + \frac{W}{c} \right) f - \frac{i\alpha}{2} k (1 - \cos \theta) f' \right\}$$

$$\psi_4 = N \frac{i\alpha}{2} k \sin \theta e^{i\varphi} f'.$$

II. С п и н ↓

$$\psi_1 = -N \frac{i\alpha}{2} \left(mc + \frac{W}{c} \right) \sin \theta e^{-i\varphi} f',$$

$$\psi_2 = N \left\{ kf - \frac{i\alpha}{2} \left(mc + \frac{W}{c} \right) (1 - \cos \theta) f' \right\}$$

$$\psi_3 = -N \frac{i\alpha}{2} k \sin \theta e^{-i\varphi} f' \quad (56)$$

$$\psi_4 = N \left\{ \left(mc + \frac{W}{c} \right) f - \frac{i\alpha}{2} k (1 - \cos \theta) f' \right\},$$

где

$$f = e^{ikr \cos \theta} F[i\alpha, 1, ikr (1 - \cos \theta)],$$

$$f' = e^{ikr \cos \theta} F[1 + i\alpha, 2, ikr (1 - \cos \theta)],$$

$$N = (2\pi)^{-3/2} \left\{ mc^2 / \sqrt{2W(W + mc^2)} \right\}, \alpha = \frac{2\pi Z e^2}{hc}.$$

Решения для отрицательных значений кинетической энергии мы получим, заменяя: $\psi_1 \rightarrow \psi_3$, $\psi_2 \rightarrow \psi_4$, $\psi_3 \rightarrow -\psi_1$, $\psi_4 \rightarrow -\psi_2$, $\alpha \rightarrow -\alpha$.

При $\theta \rightarrow 0$ эти решения являются совершенно точными, во всех остальных случаях, для очень больших значений энергии точность их порядка α^2 . В большинстве случаев основную роль играют малые значения θ ; ясно, что решения (56) представляют собой значительное уточнение решений, соответствующих плоским волнам и неприменимых в области малых значений θ .

¹⁾ Ferry, Phys. Rev, 46, 391, 1934.

ГЛАВА

СТОЛКНОВЕНИЯ МЕЖДУ ДВУМЯ ПОДВИЖНЫМИ ЧАСТИЦАМИ

(Нерелятивистская теория)

§ 1. Введение

В первых трех главах этой книги мы рассмотрели вопрос о движении электронных пучков в различных полях. Если мы предположим, что отдельные электроны в данном пучке друг с другом не взаимодействуют, то поведение пучка может быть описано с помощью волновой функции $\psi(x, y, z, t)$, причем $|\psi|^2 dx dy dz$ определяет вероятность нахождения электрона в момент времени t в элементе объема $dx dy dz$. Если мы захотим, однако, рассматривать атомные системы, в которых имеет место взаимодействие между двумя или большим числом частиц, то такое описание окажется уже невозможным; волновая функция должна быть в этом случае функцией от координат всех частиц. Примеры задач такого рода: описание атомов, содержащих больше одного электрона; задача об атоме водорода с учетом конечности массы ядра; вопрос о рассеянии α -частиц легкими ядрами, при котором нельзя пренебречь отдачей ядра; построение строгой теории рассеяния электронов атомами, учитывающей неупругие столкновения.

В этой главе мы рассмотрим прежде всего вопрос о взаимодействии двух неодинаковых частиц (§ 2). В § 3 мы рассмотрим вкратце возможные стационарные состояния атомов или молекул, содержащих две одинаковых частицы; в §§ 4 и 5 мы перейдем к рассмотрению столкновений между одинаковыми частицами, с учетом и без учета спина.

Следует подчеркнуть, что если частицы неодинаковы, то рассмотрение спина оказывается необходимым лишь в тех случаях, когда скорости их сравнимы со скоростью света (см. главу XV). Если же, однако, частицы одинаковы, то необходимо учитывать спин даже и в нерелятивистской теории.

§ 2. Взаимодействие двух неодинаковых частиц. Нерелятивистская теория без учета спина

Рассмотрим взаимодействие электрона с протоном; теорию этого явления мы сможем применить затем к задаче о водородном атоме и к вопросу о рассеянии электронов ядром этого атома. Определим волновую

функцию ψ подобно тому как мы это делали в задаче об одной частице. ψ будет зависеть от координат обеих частиц; если

$$\begin{aligned}\vec{r}_p &= (x_p, y_p, z_p) \\ \vec{r}_e &= (x_e, y_e, z_e)\end{aligned}$$

— координаты протона и электрона, то волновая функция будет иметь вид:

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p; t).$$

Она может быть интерпретирована следующим образом: если $d\tau_e$ и $d\tau_p$ — элементы объема, содержащие точки \vec{r}_e и \vec{r}_p , то

$$|\psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e; t)|^2 d\tau_p d\tau_e$$

определяет вероятность нахождения протона в элементе объема $d\tau_p$ и электрона в элементе объема $d\tau_e$ в один и тот же момент времени t .

Волновая функция ψ удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_p} \nabla_p^2 \psi + \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \nabla_e^2 \psi - V(\vec{r}_p, \vec{r}_e) \psi. \quad (1)$$

Здесь

$$\nabla_p^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_p^2};$$

m_p, m_e — массы протона и электрона; $V(\vec{r}_p, \vec{r}_e)$ — значение потенциальной энергии взаимодействия, когда протон находится в точке \vec{r}_p , а электрон в точке \vec{r}_e .

В качестве примера найдем решение ур-ния (1), описывающее движение водородного атома в свободном от сил пространстве. В этом случае потенциальная энергия взаимодействия равна

$$V(\vec{r}_p, \vec{r}_e) = -\frac{e^2}{|\vec{r}_p - \vec{r}_e|}.$$

Как и в случае задач классической механики, переменные разделяются; оказывается возможным выделить движение центра тяжести. Положим

$$\begin{aligned}(m_p + m_e)\vec{R} &= m_p \vec{r}_p + m_e \vec{r}_e \\ \vec{r} &= \vec{r}_p - \vec{r}_e.\end{aligned} \quad (2)$$

\vec{R} определяет, таким образом, положение центра тяжести обеих частиц,

\vec{r} — расстояние между ними. Оператор

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_p} \nabla_p^2 + \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \nabla_e^2$$

может быть преобразован к следующему виду¹⁾:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 M} \nabla_R^2 + \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m^*} \nabla_r^2,$$

где

$$M = m_p + m_e, \quad m^* = m_p m_e / (m_p + m_e).$$

Волновое ур-ние (1) принимает при этом вид:

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 M} \nabla_R^2 \psi + \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m^*} \nabla_r^2 \psi + \frac{e^2}{r} \psi. \quad (3)$$

В этом уравнении переменные разделяются; это означает, что решение может быть получено в форме

$$f_0(\vec{r}, t) g_0(\vec{R}, t). \quad (4)$$

Подставляя функцию (4) в ур-ние (3), получим два уравнения:

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m^*} \nabla^2 f_0 + \frac{e^2}{r} f_0 + A f_0$$

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial g_0}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 M} \nabla^2 g_0 - A g_0,$$

где A — постоянная. Подстановки

$$f_0 = f \exp(+2\pi i A t / \hbar)$$

$$g_0 = g \exp(-2\pi i A t / \hbar)$$

приводят к уравнениям

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m^*} \nabla^2 f + \frac{e^2}{r} f \quad (5)$$

$$-\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 M} \nabla^2 g. \quad (6)$$

Мы можем, таким образом, положить $\psi = fg$, где f и g удовлетворяют соответственно ур-ниям (5) и (6).

Ур-ние (6) представляет собой волновое уравнение свободной частицы массы M ; решение $g(\vec{R}, t)$ описывает поведение центра тяжести атома. Искомое частное решение зависит от экспериментальных условий. Если, например, волновая функция ψ описывает поведение пучка атомов, то функция g является волновой функцией для пучка частиц, определенной нами в § 4 главы I. Если положение и скорость атома известны приближенно, — с точностью, допускаемой соотношениями неопределенности, функция g характеризует волновой пакет, рассмотренный нами в § 9 главы I.

¹⁾ См. Френкель, Волновая механика, ч. I, § 21; Зоммерфельд, Волновая механика, стр. 34.

Ур-ние (5) представляет собою волновое уравнение, описывающее движение частицы массы m^* и заряда e в поле данного неподвижного ядра. Если мы хотим описать нормальное состояние водородного атома, функция f должна быть решением этого уравнения, соответствующим наименьшему значению энергии.

§ 3. Теория взаимодействия двух одинаковых частиц

(В этом параграфе излагается обычная теория стационарных состояний систем, содержащих две одинаковые частицы).

Мы предположим сперва, что частицы не обладают спином. В таком случае каждая из частиц обладает только тремя степенями свободы¹⁾ и состояние ее полностью определяется заданием ее положения в пространстве. (Для электрона необходимо, кроме того, задать направление его магнитного момента.) Примерами частиц такого рода являются, как это будет показано ниже, ядра гелия (т. е. α -частицы) и ядра углерода.

Прежде чем рассматривать вопрос о столкновениях, мы должны вспомнить о некоторых свойствах стационарных состояний, возможных для молекул (He_2 , C_2H_2 и т. д.), содержащих две одинаковых частицы. Если мы хотим определить значения энергии, возможные для такой молекулы, мы поступаем следующим образом. Рассмотрим молекулу гелия He_2 . Обозначим через \vec{R}_1 и \vec{R}_2 координаты обоих ядер, через $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4$ — координаты электронов. Уравнение Шредингера, характеризующее состояние всей системы, имеет вид:

$$(H - E)\psi = 0, \quad (7)$$

где ψ зависит от координат шести частиц, а H — обычный оператор энергии. Как это хорошо известно, конечные решения ψ могут быть найдены только для определенного ряда значений E — так называемых „собственных“ или „характеристических“ значений:

$$E_0, E_1, E_2, \dots$$

Можно было бы думать, что всем этим значениям соответствуют возможные стационарные состояния молекулы. В действительности, однако, только

¹⁾ Мы не утверждаем тем самым, что α -частица или ядро атома углерода „действительно“ обладают только тремя степенями свободы, т. е. что они не представляют собой сложных систем, которые могут быть разложены на составные части. Мы подразумеваем под этим лишь то обстоятельство, что вероятность нахождения этих ядер в каком-либо стационарном состоянии, отличном от нормального, чрезвычайно мала, а также, что нормальное состояние не вырождено; в таком случае, если ядро находится в состоянии покоя в свободном от сил пространстве, для описания его состояния оказывается достаточным введение трех координат.

При рассмотрении столкновений между атомами, движущимися с тепловыми скоростями, или с энергией, меньшей первого резонансного потенциала, атом гелия может быть рассматриваем как „частица без спина“ (см. § 3. 1 главы VIII).

половина общего числа этих значений наблюдается в полосатом спектре молекулы¹⁾. Исследуем причину этого расхождения.

Если не учитывать случайных вырождений, которые в общем случае могут быть устранены с помощью электрического и магнитного полей, то каждому дискретному характеристическому значению энергии E_n соответствует единственная волновая функция

$$\psi_n(\vec{R}_1, \vec{R}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4),$$

являющаяся решением дифференциального ур-ния (7). Эти решения обладают тем свойством, что они либо симметричны по отношению к координатам \vec{R}_1 и \vec{R}_2 , либо антисимметричны по отношению к ним; т. е.

$$\psi_n(\vec{R}_1, \vec{R}_2; \vec{r}_1 \dots) = \psi_n(\vec{R}_2, \vec{R}_1; \vec{r}_1 \dots) \text{ (симметрична),}$$

или же

$$\psi_n(\vec{R}_1, \vec{R}_2; \vec{r}_1 \dots) = -\psi_n(\vec{R}_2, \vec{R}_1; \vec{r}_1 \dots) \text{ (антисимметрична).}$$

Это утверждение²⁾ основывается на тождественности масс и зарядов обеих частиц и связанной с ней симметрии оператора H по отношению к координатам этих частиц.

С помощью волнового уравнения мы можем, далее, установить, что если молекула находится в состоянии, описываемом симметричной волновой функцией, то никакое возмущение не сможет перевести ее в состояние, описываемое антисимметричной волновой функцией. Обратное положение также оказывается верным. Эти результаты справедливы не только для стационарных состояний; если система, содержащая два одинаковых ядра, находится в каком-либо состоянии, описываемом симметричной волновой функцией, то последняя будет оставаться симметричной независимо от характера действующего на систему возмущения. Доказательство³⁾ этого утверждения связано с тем обстоятельством, что потенциальная энергия двух одинаковых частиц, находящихся в точках P и P' , не зависит от того, которая именно из обеих частиц находится в точке P , и которая в точке P' . Если бы частицы хоть слегка отличались друг от друга по массе или заряду, то это утверждение оказалось бы неверным, и при наличии возмущения (например, столкновения) имела бы конечная, хотя и малая, вероятность перехода системы из симметричного состояния в состояние антисимметричное.

Мы уже упоминали, что в действительности осуществляется только половина математически возможных энергетических состояний моле-

¹⁾ См. Кронин, Полосатые спектры. Это утверждение верно лишь в применении к совокупности электронных состояний, допускаемых принципом Паули.

²⁾ Доказываемое в конце этого параграфа.

³⁾ См. Дирак, Квантовая механика, гл. XI или Mott, Wave mechanics стр. 117.

кулы. Найдено, что у молекул C_2H_2 и He_2 значения энергии, наблюдающиеся в действительности, соответствуют волновой функции, симметричной по отношению к координатам ядер. Причины этого обстоятельства неизвестны ¹⁾; мы должны поэтому рассматривать его просто как экспериментальный факт; он не противоречит законам квантовой механики, но и не вытекает из них. Квантовая механика утверждает лишь, что молекула, находясь однажды в симметричном состоянии, никогда не сможет перейти в состояние антисимметричное. То обстоятельство, что в действительности наблюдается только половина возможных состояний и что смешанные состояния не наблюдаются ни при каких возмущениях, показывает, что свойства любых двух ядер гелия или углерода абсолютно тождественны. Отсюда следует также, что эти частицы не обладают четвертой степенью свободы (спином) — во всяком случае в нормальном состоянии.

Перейдем теперь к рассмотрению частиц, обладающих спином; сюда относятся электрон, протон и большинство ядер. Как мы видели в главе IV, такие частицы обладают четвертой координатой s , причем энергия каждой из них при движении в магнитном поле H , параллельном оси z , пропорциональна sH . Для электронов и протонов s может принимать только два значения: ± 1 ; для ядер, отличных от протонов, допустимы также некоторые другие значения s ²⁾. Обладая спином

частица характеризуется, таким образом, координатами (r, s) . Совокупность этих четырех координат мы будем обозначать одной буквой θ .

При определении энергетических уровней системы, содержащей две частицы со спином, например, атома гелия, содержащего два электрона, мы встречаемся со следующей трудностью ³⁾: оператор Гамильтона для такой системы точно не известен, так как поправки, вводимые наличием спина, оказываются того же порядка величины, что и „релятивистские поправки“. Самое предположение о существовании оператора Гамильтона приводит однако в этом случае к существенным качественным результатам, находящимся в согласии с экспериментальными данными о числе и порядке величины энергетических уровней и возможных переходах между ними.

¹⁾ Если рассматривать α -частицу и ядро углерода как сложные системы, состоящие из данного числа электронов и протонов, то свойства симметрии этих ядер могут быть выведены из соответствующих свойств электрона и протона. В некоторых случаях эти соображения противоречат, однако, опытным данным (см. *Kronig*, loc. cit.).

²⁾ В обычной теории сверхтонкой структуры ядру приписывается угловой момент $\frac{i\hbar}{2\pi} \left(i = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \right)$ и магнитный момент $ig(i)\hbar/4\pi mc$, где $g(i)$ число порядка $\frac{1}{1000}$. Дополнительная энергия, обусловленная взаимодействием ядра с магнитным полем H , создаваемым электронной оболочкой, равняется $\frac{m_H H g(i) \epsilon \hbar}{4\pi mc}$, где m_H — составляющая i вдоль H . См., например, *Pauling and Goudsmit*, Structure of line spectra, 1930, стр. 202.

³⁾ См. главу XV.

Обозначим через H оператор Гамильтона для системы, содержащей две одинаковых частицы со спином, например, для атома гелия. Для нахождения энергетических уровней мы должны решить волновое уравнение $(H - E)\psi = 0$.

При этом, как и прежде, имеется дискретный ряд энергетических уровней E_n , для которых могут быть найдены конечные решения — функции $\psi_n(\theta_1, \theta_2)$. Оператор H является симметричным по отношению к координатам обеих частиц; волновые функции, соответствующие каждому невырожденному стационарному состоянию, будут либо симметричны, либо антисимметричны, т. е.

$$\psi_n(\theta_1, \theta_2) = \pm \psi_n(\theta_2, \theta_1).$$

Как это было отмечено выше, переходы между состояниями, обладающими противоположной симметрией, не могут иметь места ни при каком возмущении.

Для всех исследованных частиц найдено, что энергетические уровни соответствуют либо антисимметричным волновым функциям (электроны и протоны), либо симметричным волновым функциям (α -частицы, ядра углерода или азота). Как мы уже видели, это обстоятельство находится в согласии с волновой механикой, хотя и не вытекает из нее непосредственно.

Вопрос о том, соответствует ли данному энергетическому уровню, наблюдаемому экспериментально, симметричная или антисимметричная волновая функция, может быть решен, несмотря на отсутствие точной теории взаимодействия частиц, обладающих спином, благодаря малости спиновых сил. Волновая функция, описывающая любое невырожденное состояние атома гелия, будет иметь в этом случае следующий вид:

$$\psi \left(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \right) \chi(s_1, s_2),$$

где ψ — решение уравнения Шредингера для точечных электронов (без спина). Для вычисления энергетических уровней атома мы поступим следующим образом. Прежде всего решим уравнение Шредингера для точечных электронов; решения эти, конечно, симметричны или антисимметричны по отношению к \vec{r}_1 и \vec{r}_2 . Обе группы энергетических уровней наблюдаются в действительности; уровни с антисимметричными волновыми функциями (ортогелий) оказываются, однако, триплетными. Это обстоятельство обусловлено наличием спина; существуют четыре функции χ , соответствующие четырем стационарным состояниям — трем симметричным и одному антисимметричному; в нулевом приближении они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \chi_\alpha(s_1)\chi_\alpha(s_2), & \quad \chi_\beta(s_1)\chi_\beta(s_2) \\ \chi_\alpha(s_1)\chi_\beta(s_2) & \pm \chi_\alpha(s_2)\chi_\beta(s_1). \end{aligned}$$

Функции χ_α и χ_β могут быть определены согласно методу, изложенному в § 2 главы IV. Каждому решению уравнения Шредингера соответ-

ствуют, таким образом, четыре теоретически возможных уровня энергии; из того обстоятельства, что наблюдаемые парагелиевые уровни являются синглетными, а ортогелиевые уровни — триплетными, следует, что волновые функции антисимметричны по отношению к θ_1 и θ_2 ¹⁾.

В случае двухатомных молекул с одинаковыми ядрами задача решается точно таким же образом — решаем уравнение Шредингера, пренебрегая спином ядер. Расщепление, обусловленное наличием последнего, слишком мало, чтобы быть наблюдаемым непосредственно; спиновая мультиплетность данного состояния обнаруживается только через посредство его статистического веса, определяющего относительную интенсивность некоторых вращательных уровней ²⁾.

§ 3. 1. Доказательство того, что волновые функции, описывающие поведение двух тождественных частиц, находящихся в невырожденном стационарном состоянии, либо симметричны, либо антисимметричны по отношению к координатам частиц.

Координаты частиц обозначим цифрами 1, 2; в таком случае волновая функция $\psi(1, 2)$ удовлетворяет уравнению

$$H(1, 2)\psi(1, 2) - E\psi(1, 2) = 0, \quad (\alpha)$$

где H — некоторый оператор, симметричный по отношению к координатам частиц. Мы предполагаем, что состояние невырождено; ψ является поэтому единственным конечным решением ур-ния (α) .

Переставляя координаты 1 и 2 в ур-нии (α) , получаем

$$[H(2, 1) - E]\psi(2, 1) = 0. \quad (\beta)$$

Так как H симметрично по отношению к координатам частиц, $H(2, 1)$ равняется $H(1, 2)$. Таким образом, с помощью ур-ния (β) , получаем

$$[H(1, 2) - E]\psi(2, 1) = 0. \quad (\gamma)$$

Отсюда следует, что $\psi(2, 1)$ является решением ур-ния (α) . Но так как $\psi(1, 2)$ является по предположению единственным конечным решением уравнения (α) , мы должны положить

$$\psi(2, 1) = A\psi(1, 2),$$

¹⁾ Частицы, для которых могут существовать только антисимметричные волновые функции, удовлетворяют статистике Ферми—Дирака; частицы же, для которых существуют только симметричные волновые функции, удовлетворяют статистике Бозе—Эйнштейна. Частицы, подчиняющиеся статистике Ферми—Дирака, удовлетворяют принципу Паули. Действительно, если две таких частицы находятся в состоянии, описываемых волновыми функциями ψ_a и ψ_b , то волновая функция, описывающая поведение пары частиц, имеет следующий вид:

$$\psi_a(\theta_1)\psi_b(\theta_2) - \psi_a(\theta_2)\psi_b(\theta_1).$$

Если оба состояния тождественны, то эта волновая функция обращается в нуль; отсюда следует, что две частицы не могут находиться в одном и том же состоянии.

²⁾ См. Кронн, Полосатые спектры; *Kallmann u. Schüler, Erg. d. ex. Nat.*, 11, 156, 1932.

где A — постоянная. Ясно, однако, что

$$\iint [\psi(1, 2)]^2 d\tau_1 d\tau_2 = \iint [\psi(2, 1)]^2 d\tau_1 d\tau_2$$

и что ни один из этих интегралов не обращается в нуль.

Отсюда следует, что

$$A^2 = 1.$$

Так как все входящие в эти уравнения величины вещественны, получаем

$$A = \pm 1,$$

что и требовалось доказать ¹⁾. Следует подчеркнуть, что это доказательство применимо лишь к невырожденным состояниям. Состояния с неквадратной (положительной) энергией всегда, однако, вырождены. В таким состояниям эта теорема неприменима.

§ 4. Столкновение двух тождественных частиц, не обладающих спином

Рассмотрим сперва частицы, не обладающие спином (α -частицы). Представим себе опыт, аналогичный изображенному на рис. 10. α -частицы, движущиеся со скоростью v , падают на экран AB ; α -частицы с равной и противоположной скоростью падают на экран CD . Отверстия в экранах открываются и пропускают частицы, необязательно в один и тот же момент времени. Введем в рассмотре-

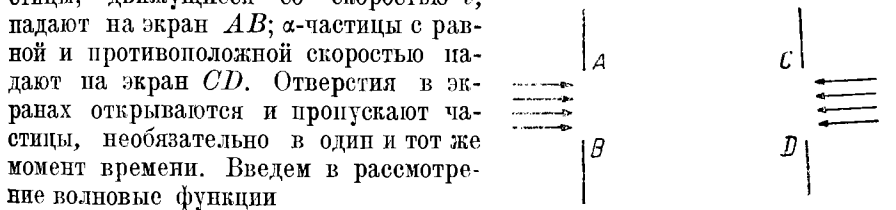


Рис. 10.

$$u(\vec{r}, t), \quad v(\vec{r}, t),$$

нормированные к единице ²⁾. Стоящая перед нами задача заключается в определении волновой функции системы для момента времени t после столкновения. Простейший способ ее решения заключался бы в приписании частицам координат r_1 и r_2 , где r_1 — координата частицы, прошедшей через AB , и т. д. В таком случае до столкновения искомая волновая функция имела бы следующий вид:

$$u(\vec{r}_1, t)v(\vec{r}_2, t); \quad (8)$$

после столкновения она определялась бы с помощью волнового уравнения типа (1) и начального условия (8). Для физической интерпретации волновой функции примем, что $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d\tau_1 d\tau_2$ определяет вероят-

¹⁾ Лежащее в основе приведенного вывода предположение о невырожденности состояния ψ является неверным в виду наличия „перестановочного“ вырождения. См. Френкель, Волн. мех. ч. 1. *Прим. ред.*

²⁾ Т. е. положим $\int |u(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1.$

ность нахождения первой α -частицы в элементе объема $(\vec{r}_1, d\tau_1)$ и второй α -частицы в элементе объема $(\vec{r}_2, d\tau_2)$ в момент времени t . Вероятность нахождения одной из частиц в $(\vec{r}_1, d\tau_1)$, а другой в $(\vec{r}_2, d\tau_2)$ определится, таким образом, следующим выражением:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 + |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2 d\tau_1 d\tau_2 \quad (9)$$

(t здесь опущено).

Этот метод решения задачи не является, однако, точным. Действительно, воспользовавшись начальной волновой функцией (8) и учитывая наличие электронов, мы получим конечную вероятность образования молекулы и более того — конечную вероятность образования любого из математически возможных стационарных состояний. Это противоречит, однако, опытным данным; мы знаем, что для He_2 наблюдаются только такие стационарные состояния, волновые функции которых симметричны по отношению к координатам ядер. Мы знаем также, что если волновая функция была первоначально симметричной, то она должна оставаться симметричной все время. Мы получим, таким образом, согласно с опытными данными только в том случае, если наша начальная волновая функция будет симметрична по отношению к координатам обеих α -частиц.

Волновые функции u и v могут быть скомбинированы в симметричную функцию следующим образом:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = k[u(\vec{r}_1)v(\vec{r}_2) + u(\vec{r}_2)v(\vec{r}_1)], \quad (10)$$

где k — некоторая постоянная. Выясним теперь физический смысл этой волновой функции.

Первоначально, согласно предположению, волновые пакеты не налагались друг на друга, откуда следует, что для любого значения \vec{r}_1 , при котором $u(\vec{r}_1)$ конечно, $v(\vec{r}_1)$ обращается в нуль. Таким образом в момент времени $t=0$

$$u(\vec{r}_1)v(\vec{r}_1) = 0.$$

Воспользовавшись функцией (10), получаем:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = k^2 |u(\vec{r}_1)v(\vec{r}_2)|^2 + k^2 |u(\vec{r}_2)v(\vec{r}_1)|^2. \quad (11)$$

Функция u обращается в нуль во всем пространстве, за исключением области вблизи щели AB , а функция v — во всем пространстве, за исключением области вблизи CD . Величина $|\psi|^2$ обращается таким образом в нуль при всех \vec{r}_1 , за исключением области вблизи AB , и при всех \vec{r}_2 , за исключением области вблизи CD , или наоборот. Мы не можем поэтому рассматривать $|\psi|^2 d\tau_1 d\tau_2$ как вероятность того, что частица, наблюдаемая в AB , находится в элементе объема $(\vec{r}_1, d\tau_1)$ и

т. д., так как эта вероятность обращается в нуль при \vec{r}_1 близком к CD . Мы должны интерпретировать $|\psi|^2 d\tau_1 d\tau_2$ как вероятность того, что одна α -частица (любая из двух) находится в элементе объема $d\tau_1$, а другая — в элементе объема $d\tau_2$. Выражение (11) даст правильное значение этой вероятности, если мы положим k равным единице¹⁾.

Мы сохраним такую интерпретацию для любой волновой функции $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, описывающей две тождественных частицы. Заметим, что если эта интерпретация имеет физический смысл, $|\psi|^2$ должно быть симметрично, т. е.

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2.$$

Существует два способа построения волновой функции, обладающей этим свойством; две возможных волновых функции имеют следующий вид:

$$u(\vec{r}_1)v(\vec{r}_2) \pm u(\vec{r}_2)v(\vec{r}_1).$$

Мы видим, таким образом, что согласно приведенным выше соображениям мы должны пользоваться либо симметричной, либо антисимметричной волновой функцией; однако, если бы не было известно, что для He_2 антисимметричные состояния в действительности не наблюдаются, то мы не знали бы, которую именно из них надлежит выбрать; с помощью волновой механики оказалось бы невозможным сделать какие-либо заключения относительно столкновений такого типа.

Конечно, подобная интерпретация функций ψ a priori не является необходимой; мы могли бы воспользоваться несимметричной волновой функцией $u(\vec{r}_1)v(\vec{r}_2)$ в момент времени $t=0$ и интерпретировать $|\psi|^2 d\tau_1 d\tau_2$ как вероятность нахождения одной из частиц в точке \vec{r}_1 . В результате мы получили бы, однако, конечные вероятности образования молекул в антисимметричных стационарных состояниях, что в действительности не наблюдается.

Применение к задаче о столкновении двух одинаковых частиц симметричной волновой функции дает для вероятности рассеяния значения, отличные от получаемых с помощью несимметричных волновых функций. Если бы мы воспользовались последними, то начальная волновая функция имела бы вид $u(\vec{r}_1)v(\vec{r}_2)$; через промежуток времени t волновая функция имела бы вид $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$. Примем, что величина $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d\tau_1 d\tau_2$ определяет вероятность того, что частица, первоначально находившаяся в AB , будет найдена в элементе объема $(\vec{r}_1, d\tau_1)$, а другая частица — в эле-

¹⁾ Это дает

$$\int |\psi|^2 d\tau_1 d\tau_2 = 2.$$

Волновая функция нормирована, таким образом, к 2.

менте объема $(\vec{r}_2, d\tau_2)$, тогда как $|\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t)|^2 d\tau_1 d\tau_2$ определяет вероятность того, что частица, первоначально находившаяся в AB , находится в элементе объема $(\vec{r}_2, d\tau_2)$ и т. д. Таким образом вероятность того, что одна из частиц находится в $(\vec{r}_1, d\tau_1)$, а другая в $(\vec{r}_2, d\tau_2)$ определяется следующим выражением [см. ур-ние (9)]:

$$\{|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 + |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2\} d\tau_1 d\tau_2. \quad (12)$$

С другой стороны, если мы будем пользоваться симметричной волновой функцией, то начальная волновая функция будет иметь следующий вид:

$$u(\vec{r}_1)v(\vec{r}_2) + u(\vec{r}_2)v(\vec{r}_1),$$

а волновая функция через промежуток времени t :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t). \quad (13)$$

Вероятность нахождения одной из частиц в элементе объема $(\vec{r}_1, d\tau_1)$, а другой — в элементе объема $(\vec{r}_2, d\tau_2)$ определится при этом величиной:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t)|^2 d\tau_1 d\tau_2, \quad (14)$$

т. е.

$$\begin{aligned} & [|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 + |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2 + \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\psi^*(\vec{r}_2, \vec{r}_1) + \\ & + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)\psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)] d\tau_1 d\tau_2. \end{aligned} \quad (15)$$

Мы видели, что применение симметричной волновой функции (13) не дает нам возможности определить вероятность нахождения в элементе объема $d\tau_1$ какой-либо определенной α -частицы, например α -частицы, первоначально находившейся вблизи AB . Если α -частица наблюдается в данной точке, то, вообще говоря, не существует такого опыта, с помощью которого можно было бы установить — находилась ли первоначально в AB именно эта α -частица или же какая-либо другая. Волновая функция не дает нам, таким образом, более точных сведений, нежели экспериментальные данные. Принципиально можно было бы определить, какая именно из α -частиц наблюдается, лишь в том случае, если бы траектория волнового пакета, описывающего поведение одной из α -частиц, не пересекалась в какой-либо точке с траекторией волнового пакета, описывающего поведение другой α -частицы. Осуществление такого рода эксперимента принципиально возможно для медленных α -частиц $\left(\frac{8\pi^2 m^2}{h^2 v} \gg 1\right)$.

На рис. 11 заштрихованные площадки представляют траектории двух волновых пакетов. Ясно, что если частица наблюдается в точке P , то

первоначально она должна была находиться в AB . Отсюда следует, что применение симметричной волновой функции дает нам в этом случае менее точные сведения, нежели экспериментальные данные. Несимметричная волновая функция дала бы нам, однако, в этом случае те же значительные вероятности нахождения частицы, что и симметричная волновая функция, так как член $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\psi^*(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ в выражении (15) обращается в нуль при всех \vec{r}_1, \vec{r}_2 .

Рассмотрим теперь подробнее вопрос о вычислении вероятности рассеяния при столкновении двух частиц. Наиболее простой для расчета случай представляют стационарные пучки бесконечной ширины. Рассмотрим два таких пучка, движущихся параллельно оси z с равными по величине $\left(\frac{1}{2}v\right)$ и противоположными по направлению скоростями. Нас интересует определение числа рассеянных частиц, дви-

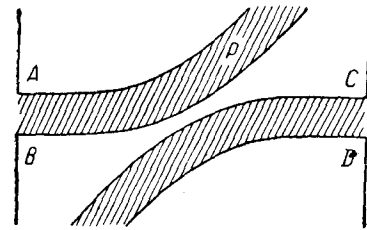


Рис. 11.

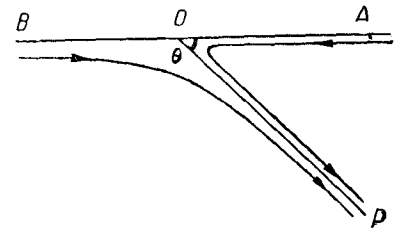


Рис. 12.

жущихся в направлении OP под углом θ к линии BA . Частица может быть отклонена на угол θ от BO или же на угол $\pi - \theta$ от AO , как это показано на рис. 12.

Для описания поведения частиц обоих типов введем в рассмотрение координаты \vec{r}_1 и \vec{r}_2 . Положим

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2).$$

Волновая функция (см. § 1 этой главы) может быть записана в следующем виде:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{R})\psi(\vec{r}).$$

В рассматриваемом нами случае центр тяжести неподвижен, функция Ψ поэтому постоянна, функция же ψ удовлетворяет уравнению

$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2 m^*}{h^2} \left[\frac{1}{2} m^* v^2 - V(r) \right] \psi = 0, \quad (16)$$

где

$$m^* = \frac{1}{2} m,$$

а $V(r)$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц. Решение $\psi(\vec{r})$ может быть получено с помощью методов, изложенных в главе II, при больших r оно имеет следующий вид:

$$\psi \sim e^{ikz} + f(\theta) r^{-1} e^{ikr}$$

где e^{ikz} характеризует „падающую волну“ (в пространстве \vec{r}), а $r^{-1} e^{ikr}$ — рассеянную волну. Если бы частицы были отличимы друг от друга, этой волновой функцией можно было бы воспользоваться для описания рассеяния. Величина $|f(\theta)|^2$ была бы при этом пропорциональна вероятности того, что линия центров обеих частиц отклонится на угол θ . Число частиц, рассеянных вдоль направления OP , было бы пропорционально величине

$$|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2.$$

Мы должны, однако, воспользоваться симметричной волновой функцией

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1).$$

При замене \vec{r}_1 на \vec{r}_2 , \vec{r}_2 становится равным $-\vec{r}_1$. Величина r остается, таким образом, неизменной, а угол θ заменяется углом $\pi - \theta$. Симметричная волновая функция имеет, таким образом, следующий вид:

$$e^{ikz} + e^{-ikz} + r^{-1} e^{ikr} [f(\theta) + f(\pi - \theta)]. \quad (17)$$

Падающая волна может быть представлена выражением:

$$2 \cos kz = 2 \cos k(z_1 - z_2);$$

среднее значение $|\psi|^2$ для падающей волны равно, таким образом, 2; волна характеризует одну частицу на единицу поперечного сечения в каждом пучке (см. примечание § 3, стр. 93). Из выражения (17) следует, что вероятность нахождения рассеянной частицы в элементе объема $d\tau_1$ и частицы, с которой она столкнулась, — в элементе объема $d\tau_2$, определяется выражением

$$\frac{1}{r^2} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\tau_1 d\tau_2,$$

где r — расстояние между $d\tau_1$ и $d\tau_2$, а θ — угол между прямой, соединяющей $d\tau_1$ с $d\tau_2$, и осью z .

Эффективное сечение для столкновения, при котором одна из частиц отклоняется внутри телесного угла $d\omega$, равняется, таким образом:

$$|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\omega. \quad (18)$$

Отсюда легко определить вероятность рассеяния для того случая, когда одна из частиц первоначально находилась в покое. При таком

столкновении траектории рассеянной и ударенной частиц расходятся под прямыми углами. Если α -частица, движущаяся со скоростью v , сталкивается с неподвижной α -частицей (ядром He), то эффективное сечение $I(\theta) d\omega$ для столкновения, в результате которого частица рассеивается на угол θ внутри телесного угла $d\omega$, согласно ур-нию (18) (см. § 5 главы VIII) определится следующим выражением:

$$I(\theta) d\omega = |f(2\theta) + f(\pi - 2\theta)|^2 4 \cos \theta d\omega. \quad (19)$$

Следует заметить, что выражение (19) определяет вероятность того, что частица будет наблюдаена при движении ее в направлении, составляющем угол θ с направлением движения падающего пучка; эта частица может быть либо α -частицей, рассеянной из первоначального пучка, либо отброшенным ядром гелия. После того как столкновение произошло, мы не можем сказать — которая из частиц является падающей, которая — ударенной; в волновой механике этот вопрос не имеет никакого смысла.

§ 4. 1. Кулоново поле. Если взаимодействие частиц с достаточной степенью точности может быть описано кулоновым полем: $V(r) = \frac{(Ze)^2}{r}$, то функция $f(\theta)$ известна, она равняется:

$$f(\theta) = -\frac{Z^2 e^2}{2m^* v^2} \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} \exp [i\alpha \lg (1 - \cos \theta) + 2i\eta_0],$$

где

$$m^* = \frac{1}{2} m, \quad \alpha = 2\pi (Ze)^2 / h v$$

и η_0 не зависит от θ . Из ур-ния (19) следует, что

$$I(\theta) = \left(\frac{Z^2 e^2}{m v^2} \right)^2 [\operatorname{cosec}^4 \theta + \sec^4 \theta + 2\Phi \operatorname{cosec}^2 \theta \sec^2 \theta] 4 \cos \theta, \quad (20)$$

где

$$\Phi = \cos (\alpha \lg \operatorname{tg}^2 \theta).$$

Соответствующие формулы классической механики¹⁾ могут быть получены из выражения (20), если мы положим $\Phi = 0$.

Следует отметить, что согласно формуле (20) при $\theta = 45^\circ$ число рассеянных частиц вдвое превышает значение, даваемое классической теорией.

Определяемое формулой (20) число частиц, рассеянных на данный угол, при $v \rightarrow 0$ не будет стремиться к значению, предсказываемому классической теорией. Рассеяние в промежутке между любыми двумя углами должно, однако, стремиться к классическому значению в виду быстрых колебаний функции Φ между $+1$ и -1 при изменении θ (для малых v , т. е. больших α).

¹⁾ Rutherford, Chadwick and Ellis, loc. cit., стр. 262.

Формула (20) была проверена экспериментально для случая рассеяния α -частиц ядрами гелия¹⁾. При этом применялись медленные α -частицы, так как только в этом случае можно считать, что взаимодействие между ядрами обратно пропорционально квадрату расстояния (см. § 5 главы XV).

§ 5. Столкновение двух тождественных частиц, обладающих спином

В предыдущем параграфе был рассмотрен вопрос о столкновении двух тождественных частиц, не обладающих спином и подчиняющихся статистике Бозе — Эйнштейна. В этом параграфе мы рассмотрим вопрос о столкновении двух тождественных частиц, обладающих спином, т. е. половиной кванта углового момента и подчиняющихся статистике Ферми — Дирака. Получаемые при этом результаты легко смогут быть обобщены для частиц, обладающих угловым моментом с любым квантованным значением и подчиняющихся любой из двух статистик.

Вернемся к рассмотрению опыта, описанного нами в начале предыдущего параграфа; если частицы обладают спином, то волновая функция, описывающая их поведение, должна зависеть также и от спиновых координат. Предположим, что частица, проходящая через щель AB , обладает спином направления \vec{l} , так что волновая функция, описывающая частицу, имеет следующий вид:

$$u(\vec{r}) \chi_l(s).$$

Волновую функцию, описывающую поведение другой частицы, запишем в виде

$$v(\vec{r}) \chi_n(s).$$

Для описания столкновения мы должны воспользоваться антисимметричной волновой функцией; волновая функция, характеризующая систему до столкновения, представится в виде²⁾:

$$u(1) \chi_l(1) v(2) \chi_n(2) - u(2) \chi_l(2) v(1) \chi_n(1).$$

Волновая функция, характеризующая конечное состояние системы (после столкновения), имеет следующий вид:

$$\Psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) = \chi_l(1) \chi_n(2) \psi(1, 2) - \chi_l(2) \chi_n(1) \psi(2, 1). \quad (21)$$

При этом мы пренебрегли мало вероятным изменением направления спинов. Вероятность того, что в момент времени t одна из частиц

будет найдена в элементе объема $(\vec{r}_1, d\tau_1)$, а другая — в элементе объема $(\vec{r}_2, d\tau_2)$, определяется выражением

$$\sum_{s_1} \sum_{s_2} |\Psi(\vec{r}_1, s_1; \vec{r}_2, s_2)|^2. \quad (22)$$

Если θ и φ ¹⁾ — полярные углы, определяющие направление \vec{l} , а θ' и φ' — направление \vec{n} , мы имеем:

$$\chi_l(s) = -\sin \frac{\theta}{2} \chi_n(s) + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \chi_p(s),$$

откуда

$$\sum_s |\chi_l(s)|^2 = 1$$

и

$$\sum_s \chi_l(s) \chi_n^*(s) = \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta'}{2} + \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta'}{2} e^{i(\varphi - \varphi')}.$$

Выражение (22) равняется, таким образом:

$$\begin{aligned} & |\psi(1, 2)|^2 + |\psi(2, 1)|^2 - [\psi(2, 1) \psi^*(1, 2) + \psi(1, 2) \psi^*(2, 1)] \times \\ & \times \left[\sin^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\theta'}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta'}{2} + \right. \\ & \left. + 2 \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta'}{2} \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta'}{2} \cos(\varphi - \varphi') \right], \end{aligned}$$

что сводится к

$$\begin{aligned} & |\psi(1, 2)|^2 + |\psi(2, 1)|^2 - \frac{1}{2} [|\psi(1, 2) \psi^*(2, 1)| + \\ & + |\psi(2, 1) \psi^*(1, 2)|] (\cos \Theta + 1), \end{aligned} \quad (23)$$

где Θ — угол между направлениями спина:

$$\cos \Theta = \vec{l} \cdot \vec{n} = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi').$$

Выражение (23) может быть, таким образом, записано в следующем виде:

$$A |\psi(1, 2) + \psi(2, 1)|^2 + B |\psi(1, 2) - \psi(2, 1)|^2,$$

где

$$A = \frac{1}{4} (1 - \cos \Theta), \quad B = \frac{1}{4} (3 + \cos \Theta).$$

Для вычисления вероятности данного столкновения мы должны воспользоваться как волновыми функциями, симметричными по отно-

¹⁾ Chadwick, Proc. Roy. Soc. A. 128, 114, 1930; Blackett and Champion, Proc. Roy. Soc. A, 130, 380, 1931.

²⁾ 1 соответствует \vec{r}_1 или s_1 , 2 — \vec{r}_2 или s_2 .

¹⁾ См. § 2 главы IV.

шению к пространственным координатам частиц, так и антисимметричными волновыми функциями. Если значение вероятности, получаемое с помощью симметричных функций, равняется P_S , а вероятность, получаемая с помощью антисимметричных функций, — P_A , то действительное значение вероятности

$$\frac{1}{4}(1 - \cos \Theta) P_S + \frac{1}{4}(3 + \cos \Theta) P_A, \quad (24)$$

где Θ угол между направлениями спинов двух сталкивающихся частиц. Если этот угол неизвестен, т. е. если два сталкивающихся пучка неполяризованы, выражение (24) должно быть усреднено по всем Θ . Так как среднее значение $\cos \Theta$ равно нулю, вероятность равняется

$$\frac{1}{4}[P_S + 3P_A]. \quad (25)$$

В качестве примера рассмотрим пучок электронов, плотность которого такова, что в единицу времени через единицу поперечного сечения проходит один электрон. Предположим, что этот пучок электронов сталкивается с отдельным свободным электроном, находящимся вначале в покое. Определим относенную к единице времени вероятность такого столкновения, в результате которого одна из частиц после столкновения будет двигаться в направлении, лежащем внутри телесного угла $d\omega$ под углом θ к направлению движения падающего пучка. В таком случае

$$\left. \begin{aligned} P_S &= \frac{e^4}{m^2 v^4} [\operatorname{cosec}^4 \theta + \sec^4 \theta + 2\Phi \operatorname{cosec}^2 \theta \sec^2 \theta] 4 \cos \theta \\ \text{и аналогично:} \\ P_A &= \frac{e^4}{m^2 v^4} [\operatorname{cosec}^4 \theta + \sec^4 \theta - 2\Phi \operatorname{cosec}^2 \theta \sec^2 \theta] 4 \cos \theta, \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

где

$$\Phi = \cos \left(\frac{2\pi e^2}{h\nu} \lg \operatorname{tg}^2 \theta \right).$$

Истинное значение вероятности определяется выражением (24) (если направление спина известно) или выражением (25) (если направление спина неизвестно).

Отметим, что если спины направлены одинаково, то мы должны пользоваться только антисимметричным решением. Отсюда следует, что рассеяние электронов на угол 45° наблюдаться не будет. Если же спины антипараллельны, так что Θ равно 180° , число рассеянных электронов равняется

$$\frac{1}{2}[P_S + P_A],$$

т. е. совпадает со значением, предсказываемым классической теорией.

Практически рассеяние пучка электронов неподвижными электронами оказывается возможным наблюдать лишь в том случае, когда

„неподвижные“ электроны являются связанными атомными электронами. Падающий пучок должен при этом обладать столь большой энергией, чтобы силами связи и движением атомных электронов можно было пренебречь. Если последнее условие выполняется, мы имеем:

$$\frac{2\pi e^2}{h\nu} \ll 1.$$

Член Φ в выражении (26) может быть, таким образом, заменен единицей, за исключением случая малых углов, когда отклонения от классических формул малы при любых условиях.

Вильямс¹⁾ сравнил формулы (25) и (26) с экспериментальными данными, относящимися к наблюдениям пад электронами с энергией 20 000 вольт в камере Вильсона. При этом было получено хорошее согласие с теоретическими формулами.

Рассеяние протонов в водороде было исследовано Гертсеном²⁾, причем были получены данные, говорящие в пользу формулы (25).

§ 6. Столкновение одинаковых ядер

Если пучок атомов пропускается через газ, состоящий из атомов того же сорта, и если при этом энергия пучка такова, что наименьшее расстояние между частицами при рассеянии на данный угол меньше, нежели радиус K -оболочки, то влиянием электронов при рассмотрении столкновения можно пренебречь. Число рассеянных частиц определяется при этом формулой³⁾

$$C_S P_S + C_A P_A,$$

P_S и P_A заданы выражениями (26), где m и e — масса и заряд рассматриваемых ядер. Вид коэффициентов C_S и C_A зависит от рода статистики, которой подчиняется данное ядро, а также от числа квантов спина.

Отношение $\frac{C_S}{C_A}$ равно отношению интенсивности симметричных линий к интенсивности линий антисимметричных во вращательном полосатом спектре двухатомной молекулы рассматриваемого элемента. Таким образом,

$$\begin{aligned} C_S : C_A &= s_n (s_n + 1) && \text{(Ферми — Дирак)} \\ &= (s_n + 1) / s_n, && \text{(Эйпштейн — Бозе)} \end{aligned}$$

где $\frac{s_n h}{2\pi}$ угловой момент ядра (для протонов $s_n = \frac{1}{2}$, для He $s_n = 0$, для N_{14} $s_n = 1$ и т. д.). Более подробные сведения о ядерных спинах читатель может найти у Кронига⁴⁾, Кальмана и Шулера⁵⁾.

1) Williams, Proc. Roy. Soc. A, 128, 459, 1930.

2) Gerthsen, Ann. d. Phys. 9, 769, 1931.

3) Sehl, Zs. f. Phys. 80, 539, 1933.

4) Kronig, Полосатые спектры.

5) Kallmann und Schüler, Ergebnisse d. exact. Naturwiss, 11, 265, 1932.

ГЛАВА VI

НЕОДНОРОДНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

В этой главе рассматриваются методы решения некоторых дифференциальных уравнений типа

$$L\Psi = F,$$

где L — линейный дифференциальный оператор второго порядка, а F — некоторая известная функция.

§ 1. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Общее решение

Общий вид рассматриваемых в этом параграфе дифференциальных уравнений

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 2p \frac{dy}{dx} + qy = f, \quad (1)$$

где p, q, f — известные функции от x ; с помощью подстановки

$$y = \Psi \exp \left[- \int^x p dx \right]$$

это уравнение может быть приведено к виду

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + Q\Psi = F. \quad (2)$$

Мы ограничимся поэтому рассмотрением ур-ния (2).

Заметим, что уравнение вида

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dy}{dx} + qy = f \quad (1.1)$$

с помощью подстановки

$$y = x^{-1} \Psi$$

может быть приведено к форме

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + q\Psi = fx. \quad (2.1)$$

Существует несколько методов решения ур-ния (2).

Метод I. Предположим, что нам известны два независимых решения ур-ния

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + Q\psi = 0. \quad (3)$$

Обозначим их через ψ_1 и ψ_2 . Из ур-ния (3) следует, что

$$\frac{d}{dx} \left(\psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} - \psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} \right) = 0.$$

Мы можем поэтому умножить ψ_1 и ψ_2 на постоянные коэффициенты таким образом, что

$$\frac{d\psi_1}{dx} \psi_2 - \frac{d\psi_2}{dx} \psi_1 = 1 \quad (\text{при любых } x). \quad (4)$$

Если ψ_1 и ψ_2 выбраны так, что соотношение (4) удовлетворяется, то

$$\Psi = \psi_1(x) \int_a^x \psi_2 F dx + \psi_2(x) \int_x^b \psi_1 F dx \quad (5)$$

представляет собою решение ур-ния (2), как это может быть проверено путем подстановки (5) в ур-ние (2). Так как, далее функция (5) содержит две произвольных постоянных a и b , она является общим решением ур-ния (2).

Этот метод рассмотрен подробнее в книге *Курант — Гильберт, Методы математической физики*.

Метод II. Предположим, что нам известно одно из решений ур-ния (3); обозначим его через ψ . Сделав в ур-нии (2) подстановку

$$\Psi = \psi \zeta,$$

мы получим:

$$\frac{d^2\zeta}{dx^2} \psi + 2 \frac{d\zeta}{dx} \frac{d\psi}{dx} = F.$$

Отсюда следует, что

$$\psi^2 \frac{d\zeta}{dx} = \int_a^x F \psi dx', \quad (6)$$

и далее

$$\Psi = \psi(x) \int_{\beta}^x [\psi(x')]^{-2} dx' \int_a^{x'} F(x'') \psi(x'') dx''. \quad (7)$$

Выражение (7) представляет собою искомое решение, содержащее две произвольных постоянных a и β .

Для задач, рассматриваемых в этой главе, наиболее пригодным является первый метод.

§ 2. Решение, удовлетворяющее граничным условиям

В этом параграфе мы покажем, как найти решение уравнения

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + Q\Psi = F(x),$$

удовлетворяющее определенным граничным условиям. Предположим, что функции Q и F удовлетворяют следующим условиям

$$F(x) \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \infty,$$

причем функция $F(x)$ конечна и дифференцируема во всей области $0 < x < \infty$, за исключением точки $x=0$, где у нее может иметься полюс порядка x^{-1} , а

$$Q(x) = A - U(x),$$

где A — постоянная, а U — функция, для которой

$$xU(x) \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \infty,$$

причем $U(x)$ конечна и дифференцируема во всей области за исключением точки $x=0$, где она может иметь полюс вида $\frac{n(n+1)}{x^2}$ (n — положительное целое число или нуль).

Наложим на функцию Ψ два следующих граничных условия:

1) В точке $x=0$ Ψ должна обращаться в нуль. Из характеристического уравнения следует, что вблизи $x=0$ одно из решений будет вести себя как x^{n+1} , а другое как x^{-n} ; в начале координат одно из решений будет таким образом обращаться в нуль.

2) Второе граничное условие связано со знаком A . Если A положительно, мы будем полагать

$$A = k^2$$

и выберем Ψ так, чтобы при $x \rightarrow \infty$

$$\Psi \sim \text{const} \cdot e^{ikx}.$$

Если A отрицательно, мы выберем функцию Ψ таким образом, чтобы она была конечна при $x \rightarrow \infty$. Мы увидим в дальнейшем, что эти два условия полностью определяют Ψ , и что всегда оказывается возможным найти функцию Ψ , удовлетворяющую этим условиям при всех значениях A , за исключением одного частного случая.

Рассмотрим сперва случай положительного A . Интересующее нас уравнение имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + [k^2 - U(x)]\Psi = F(x). \quad (8)$$

Обозначим через ψ_1 обращающееся в нуль в начале координат решение уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [k^2 - U(x)]\psi = 0. \quad (9)$$

Предположим, что ψ_1 нормировано следующим образом¹⁾

$$\psi_1 \sim \sin(kx + \eta) \quad (x \text{ велико})$$

Через ψ_2 обозначим решение уравнения (9), для которого

$$\psi_2 \sim k^{-1} \exp i(kx + \eta) \quad (x \text{ велико})$$

При всех значениях x ψ_1 и ψ_2 удовлетворяют соотношению

$$\psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} = 1.$$

Выражение (5) является, таким образом, общим решением уравнения (8). Обращающееся в нуль в начале координат решение будет, очевидно:

$$\Psi = \psi_1(x) \int_a^x \psi_2 F dx - \psi_2(x) \int_0^x \psi_1 F dx. \quad (10)$$

При $x \rightarrow \infty$ оба интеграла сходятся; решение искомой формы для больших x мы получим, положив: $a = \infty$. Это дает:

$$\Psi \sim -k^{-1} e^{ikx + i\eta} \int_0^\infty \psi_1 F dx. \quad (11)$$

Решение требуемой формы всегда может быть, таким образом, найдено при условии сходимости интегралов

$$\int_0^\infty F(x) \exp(\pm ikx) dx$$

Рассмотрим теперь случай отрицательного A . Полагая

$$A = -\gamma^2,$$

мы будем решать уравнение

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + [-\gamma^2 - U(x)]\Psi = F(x) \quad (12)$$

при условии, что функция Ψ обращается в нуль в начале координат и остается конечной на бесконечном расстоянии.

Пусть попрежнему ψ_1 — решение уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [-\gamma^2 - U(x)]\psi = 0, \quad (13)$$

обращающееся в нуль в начале координат. В общем случае это решение, соответствующим образом нормированное при больших x , будет вести себя как $\exp(+\gamma x)$. Только при некоторых определенных значениях γ (собственных значениях) ψ будет иметь асимптотический вид $\exp(-\gamma x)$.

¹⁾ См. главу II. § 1.

Если γ не является собственным значением, то искомое решение может быть найдено следующим образом: обозначим через ψ_2 решение ур-ния (13), имеющее асимптотический вид

$$\psi_2 \sim \gamma^{-1} \exp(-\gamma x).$$

Тогда искомое решение ур-ния (12):

$$\Psi = \frac{1}{2} \left(\psi_1 \int_{-\infty}^x \psi_2 F dx - \psi_2 \int_0^x \psi_1 F dx \right) \quad (14)$$

стремится к нулю при возрастании x до бесконечности, если при этом $F(x) \rightarrow 0$.

Если γ — собственное значение, то решение ψ_1 , обращающееся в нуль в начале координат, имеет асимптотический вид $\exp(-\gamma x)$, а в качестве ψ_2 мы должны выбрать решение, ведущее себя как $\gamma^{-1} \exp \gamma x$; обращающееся в нуль в начале координат решение ур-ния (12):

$$\Psi = \frac{1}{2} \left(\psi_1 \int_a^x \psi_2 F dx - \psi_2 \int_0^x \psi_1 F dx \right)$$

при больших x будет вести себя как

$$\frac{1}{2} \left(e^{-\gamma x} \int_a^x \psi_2 F dx - e^{\gamma x} \gamma^{-1} \int_0^x \psi_1 F dx \right).$$

Можно показать, что первый член этого выражения конечен, так как $F \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$; мы можем, таким образом, получить конечное решение в том и только в том случае, если

$$\int_0^x \psi_1 F dx \rightarrow 0. \quad (15)$$

Второй метод, с помощью которого может быть найдено решение ур-ния (12), есть обычный метод, применяющийся в теории возмущений. Положим

$$\left. \begin{aligned} F(x) &= \sum_n a_n \psi_n(x), \\ \Psi(x) &= \sum_n b_n \psi_n(x), \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

где ψ_n — нормированные характеристические функции уравнения

$$\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + [-\gamma_n^2 - U(x)] \psi_n = 0. \quad (17)$$

подчиняющиеся следующим условиям: при $x=0$ ψ должно обращаться в нуль, а при $x=\infty$ оно должно оставаться конечным.

В данном случае суммирование включает также и интегрирование по непрерывной области γ_n^2 ($-\gamma_n^2$ положительно). Дискретных значений γ_n^2 может даже и не быть вовсе.

Подставляя функцию (16) в уравнение (12), умножая последнее на ψ_n и интегрируя по всем x , получаем:

$$b_n = a_n (\gamma_n^2 - \gamma^2)^{-1}.$$

Если γ — одно из характеристических значений, например γ_m , то решение обращающееся в нуль при $x=0$ и при $x=\infty$, существует только при условии: $a_m = 0$, т. е. если

$$\int_0^{\infty} F(x) \psi_m(x) dx = 0.$$

Последнее условие эквивалентно условию (15).

§ 3. Дифференциальные уравнения в частных производных

В этом параграфе положение точки в трехмерном пространстве мы будем определять ее декартовыми координатами (x, y, z) , или же сферическими координатами (r, θ, φ) , или же вектором \vec{r} .

Обозначим через L оператор:

$$L = \nabla^2 + k^2 - U(r),$$

где $U(r)$ — функция, для которой

$$rU(r) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Обозначим через $F(x, y, z)$ функцию, для которой $rF \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Нашей задачей является нахождение решения ψ уравнения

$$L\psi = F(x, y, z), \quad (18)$$

удовлетворяющего следующим граничным условиям:

ψ конечно во всем пространстве

$$\psi \sim r^{-1} e^{ikr} f(\theta, \varphi) \text{ (при больших } r), \quad (19)$$

где $f(\theta, \varphi)$ — подлежащая определению функция.

Для нахождения решения ур-ния (18) разложим ψ и F в ряд по шаровым функциям. Положим

$$P_n^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} P_n(\cos \theta), \quad (m > 0)$$

и будем считать, что

$$P_n^m = P_n^{-m}.$$

Положим далее:

$$F(x, y, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^{m=n} A_n^m(r) P_n^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

Искомое решение ψ представим в виде

$$\psi(x, y, z) = \sum_n \sum_m B_n^m(r) P_n^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (20)$$

Подставив эти выражения в ур-ние (18), умножив последнее на

$$P_n^m(\cos \theta) e^{-im\varphi} \sin \theta \, d\theta \, d\varphi$$

и проинтегрировав по поверхности сферы (т. е. по θ от 0 до 2π и по φ от 0 до 2π) мы получим:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dB_n^m}{dr} \right) + \left(k^2 - U(r) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) B_n^m = A_n^m(r). \quad (21)$$

Полагая далее

$$B_n^m = r^{-1} b_n^m,$$

получаем

$$\frac{d^2}{dr^2} b_n^m + \left(k^2 - U(r) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) b_n^m = r A_n^m(r),$$

т. е. уравнение типа, рассмотренного нами в §§ 1 и 2. С помощью выражения (14) находим решение ур-ния (21), удовлетворяющее требуемым граничным условиям:

$$B_n^m = -k L_n(r) \int_r^{\infty} H_n(r) A_n^m(r) r^2 dr - k H_n(r) \int_0^r L_n(r) A_n^m(r) r^2 dr, \quad (22)$$

где L_n, H_n — решения уравнения

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dL}{dr} \right) + \left(k^2 - U(r) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) L = 0,$$

причем L_n конечно в начале координат и нормировано таким образом, что его асимптотическая форма ¹⁾

$$L_n \sim (kr)^{-1} \sin \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n \right),$$

а H_n имеет асимптотическую форму:

$$H_n \sim (kr)^{-1} \exp i \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n \right).$$

Выражения (20) и (22) дают нам искомое решение ур-ния (18).

Во многих случаях оказывается удобным представить это решение в виде интеграла:

$$\psi = \int \int \int K(\vec{r}, \vec{r}') F(x', y', z') dx' dy' dz'. \quad (23)$$

Полагая

$$K = -\frac{k}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) L_n(r) H_n(r') P_n(\cos \Theta) \quad (r > r') \\ = -\frac{k}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) H_n(r) L_n(r') P_n(\cos \Theta) \quad (r < r'),$$

где

$$\cos \Theta = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi'),$$

легко показать, что функция (23) является искомым решением. Действительно ¹⁾

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \theta \, d\theta P_n(\cos \Theta) P_n^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) = \\ = \frac{4\pi}{2n+1} P_n^m(\cos \theta') \exp(im\varphi'). \quad (24)$$

Отсюда следует, что выражение (23) эквивалентно решению, определяемому выражениями (20) и (22).

§ 3. 1. Асимптотическая форма решения. При больших r и заданном \vec{r}' имеем:

$$K(\vec{r}, \vec{r}') \sim -\frac{1}{4\pi} r^{-1} e^{ikr} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) e^{-\frac{1}{2} i n\pi + i \eta_n} L_n(r') P_n(\cos \Theta).$$

Обозначив через $\mathfrak{F}(r, \theta)$ функцию ²⁾

$$\mathfrak{F} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n e^{i \eta_n} L_n(r) P_n(\cos \theta),$$

получим

$$K(\vec{r}, \vec{r}') \sim -\frac{1}{4\pi} r^{-1} e^{ikr} \mathfrak{F}(r', \pi - \Theta).$$

¹⁾ См. главу II, § 1. Условие конечности L в начале координат определяет η_n .

²⁾ Уиттекер и Ватсон, Курс современного анализа, ГТИИ. Гл. II, ур-ние (16). Асимптотическая форма \mathfrak{F} имеет вид: $\exp(ikz) + r^{-1} f(\theta) \exp(ikr)$.

Решение ψ имеет, таким образом, асимптотическую форму:

$$\psi \sim -\frac{1}{4\pi} r^{-1} e^{ikr} \int \int \int \mathfrak{F}(r', \pi - \Theta) F(x', y', z') dx' dy' dz', \quad (25)$$

при условии, что интеграл сходится.

Уравнение

$$L\psi = F(x, y, z),$$

где

$$L = \nabla^2 - \gamma^2 - U(r),$$

может быть решено аналогичным образом. Конечное решение всегда может быть найдено, если γ не является собственным значением уравнения (см. § 2):

$$L\psi = 0.$$

§ 4. Решение уравнения $(\nabla^2 + k^2)\psi = F(x, y, z)$. (26)

Уравнение $(\nabla^2 + k^2)\psi = F(x, y, z)$ представляет собою частный случай уравнения, рассмотренного нами в предыдущем параграфе; оно получается из него при $U(r) = 0$. В этом случае

$$\mathfrak{F}(r, \theta) = \exp(ikz)$$

и следовательно, согласно (25), асимптотическая форма решения ψ :

$$\psi \sim -\frac{1}{4\pi} r^{-1} e^{ikr} \int \int \int \exp(-ik\vec{n} \cdot \vec{r}') F(x', y', z') dx' dy' dz', \quad (27)$$

где \vec{n} — единичный вектор в направлении θ, φ , так что

$$\vec{n} \cdot \vec{r}' = r' [\cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')].$$

Решение ψ имеет вид

$$\psi = \int \int \int K(\vec{r}, \vec{r}') F(x', y', z') dx' dy' dz',$$

где

$$K = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|},$$

как это может быть показано с помощью ур-ния (24), или же непосредственно следующим образом:

Воспользуемся теоремой ¹⁾, согласно которой для двух конечных и дважды дифференцируемых функций f и g и некоторого объема Ω , ограниченного замкнутой поверхностью Σ , имеет место соотношение

$$\int_{\Sigma} \left(f \frac{\partial g}{\partial n} - g \frac{\partial f}{\partial n} \right) dS = \int_{\Omega} (f \nabla^2 g - g \nabla^2 f) dx dy dz. \quad (28)$$

¹⁾ Jeans, Electricity and Magnetism, стр. 160.

Здесь $\partial/\partial n$ означает дифференцирование по внешней нормали к элементу поверхности dS объема Ω ; в левой части равенства интегрирование производится по поверхности Σ , в правой части интеграл берется по объему Ω . Воспользуемся этой теоремой, заменив функцию f решением ψ уравнения (26), удовлетворяющим граничным условиям. В качестве независимой переменной выберем \vec{r}' , так что $f = \psi(\vec{r}')$. Вместо g подставим выражение $K(\vec{r}, \vec{r}')$, рассматривая его как функцию от \vec{r}' при постоянном \vec{r} . В качестве Ω мы возьмем объем, ограниченный двумя сферами ω_1 и ω_2 , центры которых находятся в точке r . Радиус сферы ω_1 обозначим через ρ_1 и будем стремиться его к бесконечности; радиус ρ_2 сферы ω_2 будем стремиться к нулю. Точка $\vec{r} = \vec{r}'$, в которой K имеет полюс, находится, таким образом, вне объема Ω .

В результате мы получаем

$$\int \left(\psi \frac{\partial K}{\partial n'} - K \frac{\partial \psi}{\partial n'} \right) dS' = \int \int \int (\psi \nabla^2 K - K \nabla^2 \psi) dx' dy' dz'. \quad (29)$$

Далее, во всем объеме Ω

$$\nabla^2 K = -k^2 K,$$

и

$$\nabla^2 \psi = -k^2 \psi + F(x', y', z').$$

Правая часть ур-ния (29) равняется, таким образом,

$$-\int \int \int K(\vec{r}, \vec{r}') F(x', y', z') dx' dy' dz'. \quad (30)$$

Интеграл, стоящий в левой части ур-ния (29), может быть разбит на две части: интеграл по внешней поверхности ω_1 и интеграл по внутренней поверхности ω_2 . Воспользовавшись асимптотическими значениями ψ и K , легко показать, что при возрастании радиуса ω_1 до бесконечности первый интеграл стремится к нулю. Выражение

$$\int_{\omega_2} K \frac{\partial \psi}{\partial n'} dS'$$

обращается в нуль при $\omega_2 \rightarrow 0$; K имеет полюс первого порядка в центре шара, откуда следует, что при $\omega_2 \rightarrow 0$:

$$\int_{\omega_2} \frac{\partial K}{\partial n'} \psi dS' \rightarrow -\psi(\vec{r}) \int_{\omega_2} \frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} dS'.$$

Сравнив это выражение с выражением (30), находим:

$$\psi(\vec{r}) = \int \int \int K(\vec{r}, \vec{r}') F(x', y', z') dx' dy' dz',$$

что и требовалось доказать.

Интеграл, стоящий в правой части этого равенства, характеризует расходящуюся волну; для того чтобы ψ могло иметь асимптотический вид (2), мы должны, следовательно, положить:

$$G = e^{ikz}.$$

Для нахождения $f(\theta)$ мы воспользуемся асимптотической формой выражения (3) при больших r . Обозначая через \vec{n} единичный вектор направления \vec{r} , т. е.

$$\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta),$$

мы имеем при $r' \ll r$

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \sim r - \vec{n} \cdot \vec{r}' + \text{члены порядка } \frac{1}{r}$$

и следовательно:

$$\psi \sim e^{ikz} - r^{-1} e^{ikr} \frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\vec{n} \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\tau'. \quad (4)$$

Формулы (3) и (4) являются точными. Интересно отметить, что рассеянная волна имеет такой же вид, как если бы каждый элемент объема рассеивал шаровую волну с амплитудой равной, на единице расстояния, выражению $-2\pi m \hbar^{-2} V(\vec{r}) d\tau$, умноженному на амплитуду падающей волны в данной точке ¹⁾.

Предположив, что волна не сильно диффрагируется рассеивающим центром, мы можем определить функцию $f(\theta)$. В этом случае функция $\psi(\vec{r}')$ в интеграле (4) может быть заменена невозмущенной волновой функцией $\exp(ikz')$. Это приближение справедливо только для быстрых частиц (см. § 2 и главу IX).

Мы получаем при этом из ур-ний (2) и (4):

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int \exp[ik(\vec{n}_0 - \vec{n}) \cdot \vec{r}] U(\vec{r}) d\tau, \quad (5)$$

где \vec{n}_0 — единичный вектор, направленный вдоль оси z , так что $z = \vec{n}_0 \cdot \vec{r}$. Этот интеграл может быть вычислен с помощью сферических координат α, β , если ось $\alpha = 0$ направлена вдоль вектора $\vec{n}_0 - \vec{n}$. Мы получаем при этом

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_0^\infty r^2 dr e^{ikr \cos \alpha} U(\vec{r}),$$

¹⁾ См. Mott, Proc. Roy. Soc. A. 127, 658, 1930.

ГЛАВА VII

РАССЕЯНИЕ СИЛОВЫМ ЦЕНТРОМ

(Интегральное уравнение; различные теоремы)

§ 1. Приближение Борна

Стоящая перед нами в этом параграфе задача, подобно задаче главы II, заключается в рассмотрении рассеяния пучка частиц заданным силовым полем $V(\vec{r})$; в этой главе мы найдем приближенные формулы, справедливые только для быстрых частиц; получение их окажется значительно более простым, нежели получение точных формул главы II [ур-ние (17)].

Мы будем решать волновое уравнение

$$\nabla^2 \psi + [k^2 - U(\vec{r})] \psi = 0, \quad (1)$$

где

$$k^2 = 8\pi^2 m E / \hbar^2, \quad U(\vec{r}) = 8\pi^2 m V(\vec{r}) / \hbar^2,$$

а ψ имеет асимптотический вид

$$\psi \sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} f(\theta). \quad (2)$$

Воспользуемся доказанной в § 4 главы VI теоремой, согласно которой наиболее общее конечное решение уравнения:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = F(x, y, z),$$

где $F(x, y, z) = F(\vec{r})$ — известная функция, имеет вид:

$$\psi = G(x, y, z) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} F(\vec{r}') d\tau',$$

причем G — общее решение уравнения

$$\nabla^2 G + k^2 G = 0.$$

Отсюда следует, что общее решение ур-ния (1) удовлетворяет интегральному уравнению

$$\psi = G - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\tau'. \quad (3)$$

где

$$K = k |\vec{n}_0 - \vec{n}| = 4\pi \sin \frac{\theta}{2} / \lambda, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{mv}.$$

Выполнив интегрирование по α и β , имеем

$$f(\theta) = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} \int_0^\infty \frac{\sin Kr}{Kr} V(r) r^2 dr. \quad (6)$$

Эта формула и представляет собой искомый результат; интенсивности или вероятность рассеяния внутри телесного угла $d\omega$ определяется величиной $|f(\theta)|^2 d\omega$.

Если $V(r)$ характеризует атомное поле, то часто оказывается удобным преобразовать выражение (6) в форме интеграла, содержащего плотность заряда в атоме; обозначая через $-\epsilon\rho(r)$ плотность заряда в любой точке, получаем:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + e^2 \int \frac{\rho(r') d\tau'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (7)$$

Подставляя выражение (7) в интеграл (6), мы получаем с помощью соотношения¹⁾

$$\int \frac{\exp(i\vec{n} \cdot \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\tau' = \frac{4\pi}{|\vec{n}|^2} e^{i(\vec{n} \cdot \vec{r})}$$

следующий окончательный результат:

$$f(\theta) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \epsilon^2 \frac{Z - F(\theta)}{K^2} = \frac{\epsilon^2}{2mv^2} [Z - F(\theta)] \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2}, \quad (8)$$

где

$$F(\theta) = 4\pi \int_0^\infty \rho(r) \frac{\sin Kr}{Kr} r^2 dr. \quad (9)$$

Величина F называется обычно атомным фактором рассеяния; она была вычислена в некотором интервале значений K для всех элементов²⁾.

Формула (8) может быть сравнена с соответствующей формулой для рентгеновых лучей. Интенсивность рассеяния рентгеновых лучей атомом на угол θ внутри телесного угла $d\omega$ равняется

$$\left[\frac{e^2}{mc^2} F(\theta) \right]^2 d\omega (1 + \cos^2 \theta).$$

Сходство этих двух выражений может быть объяснено весьма простым образом³⁾.

¹⁾ См. § 1. 1 главы XI.

²⁾ См. главу IX.

³⁾ См. *Mott*, loc. cit.

§ 1. 1. Замечания о рассеянии, определяемом формулой Борна. Амплитуда рассеяния может быть вычислена с помощью формулы (6) или формулы (8). Из этих формул следует, что рассеяние зависит только от $\sin \frac{\theta}{2} / \lambda$, т. е. только от $v \sin \frac{\theta}{2}$. В случае точной формулы главы II мы имели, однако, иной результат. Приводимые здесь соотношения можно считать справедливыми лишь при тех условиях (быстрые электроны), когда применима формула Борна.

Из формулы (6) следует, что в том случае, когда $V(r)$ стремится к нулю быстрее, нежели r^{-3} по мере возрастания r до бесконечности, функция $f(\theta)$ при убывании θ до нуля остается конечной. Это справедливо также и для точной формулы, определяющей $f(\theta)$ [см. ур-ние (17) главы II].

Для заданного атома при $\theta = 0$ значение $f(\theta)$ от v не зависит. При больших значениях v функция $f(\theta)$ с возрастанием θ убывает быстрее, нежели при малых v .

При возрастании K функция $F(\theta)$ стремится к нулю, откуда можно заключить, что при больших скоростях и больших углах рассеяния $f(\theta)$ стремится к $(Ze^2/2mv^2) \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2}$, так что рассеяние обусловлено в основном влиянием ядра, как это и следовало ожидать. Отсутствие фазового множителя в выражении для $f(\theta)$ [см. ур-ние (16) главы II] является следствием применения приближения Борна.

§ 2. Соотношение между формулой Борна и точной формулой для $f(\theta)$

Точная формула для $f(\theta)$ [см. ур-ние (17) главы II]

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) [\exp(2i\eta_n) - 1] P_n(\cos \theta). \quad (10)$$

Формула Борна дает [см. ур-ние (6)]:

$$f(\theta) = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} \int_0^\infty V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} r^2 dr. \quad (11)$$

В этом параграфе мы выясним — при каких обстоятельствах формула (11) является хорошим приближением к формуле (10). В § 2 главы II было найдено приближенное выражение для η_n , справедливое при малых значениях η_n . Мы получили при этом

$$\eta_n \approx -\frac{8\pi^2 mk}{h^2} \int_0^\infty V(r) [f_n(r)]^2 r^2 dr, \quad (12)$$

где

$$f_n(r) = (\pi/2kr)^{\frac{1}{2}} J_{n+\frac{1}{2}}(kr).$$

Формулы (11) и (12) были получены нами в результате рассмотрения $V(r)$ как малого возмущения; можно ожидать поэтому, что, подставив (12) в (10), мы получим формулу (11). Это подтверждается с помощью хорошо известного разложения¹⁾

$$\frac{\sin Kr}{Kr} = \sum_n (2n+1) P_n(\cos \theta) [f_n(r)]^2,$$

если $\exp(2i\eta_n) - 1$ в выражении (10) заменено через $2i\eta_n$.

Формула (12) часто оказывается пригодной для вычисления η_n даже в том случае, когда η_n одного порядка с $\frac{\pi}{2}$; в этом случае пользоваться формулой Борна нельзя; однако выражение (12) может быть непосредственно подставлено в формулу (10) (см. § 5 главы IX).

§ 3. Классический предел квантовых формул рассеяния

Хорошо известно, что, полагая в любой формуле квантовой теории $\hbar \rightarrow 0$, мы получим соответствующую формулу классической теории. Представляется интересным показать, что это имеет место и для нашей формулы [см. ур-ние (17) главы II], определяющей число частиц, рассеянных полем $V(r)$. Мы можем выяснить при этом, при каких условиях число рассеянных частиц будет одинаково с точки зрения обеих теорий.

Найдем прежде всего выражение для числа рассеянных частиц, даваемое классической теорией.

Если рассеивающий центр поместить в начале координат, то уравнение для любой орбиты с энергией E и угловым моментом J в полярных координатах r и φ будет иметь следующий вид:

$$\varphi + \int \frac{\partial}{\partial J} [2m(E - V) - J^2/r^2]^{\frac{1}{2}} dr = 0. \quad (13)$$

Если r_0 — положительный корень уравнения:

$$2m(E - V) - J^2/r^2 = 0,$$

а α — угол между асимптотами орбиты, то

$$\frac{1}{2} \alpha = - \int_{r_0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial J} [2m(E - V) - J^2/r^2]^{\frac{1}{2}} dr, \quad (14)$$

причем угол отклонения θ определяется уравнением

$$\theta = \pi - \alpha. \quad (15)$$

С помощью ур-ний (14) и (15) мы можем, таким образом, вычислить импульс J , соответствующий данному отклонению θ .

Рассмотрим теперь поток частиц, движущихся со скоростью v , в котором в единицу времени через единицу поперечного сечения проходит N частиц. Вероятное число частиц, пересекающих в единицу времени плоскость, перпендикулярную к направлению потока, и обладающих

¹⁾ Watson, Theory of Bessel Functions, стр. 363, ур-ние (3).

угловым моментом в интервале между J и $J + dJ$, равняется при этом $2\pi N J dJ / m^2 v^2$.

Число частиц, рассеянных между углами θ и $\theta + d\theta$, определяется выражением:

$$\frac{2\pi N J}{m^2 v^2} \frac{dJ}{d\theta} d\theta,$$

при чем зависимость J от θ дается выражениями (14) и (15). В § 1 главы II мы обозначали это число через $2\pi N I(\theta) \sin \theta d\theta$. Мы имеем таким образом:

$$I(\theta) = \frac{J}{m^2 v^2} \frac{dJ}{d\theta} \frac{1}{\sin \theta}. \quad (16)$$

Рассмотрим теперь формулы квантовой теории. Нас интересует решение уравнения

$$\frac{d^2 L}{dr^2} + F(r) L = 0, \quad (17)$$

где

$$F(r) = \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (E - V) - \frac{n(n+1)}{r^2}.$$

Так как мы рассматриваем случай $\hbar \rightarrow 0$, мы можем предположить, что F велико. В таком случае решения ур-ния (17) имеют следующий приближенный вид¹⁾:

$$F^{-\frac{1}{4}} \exp \left[\pm i \int^r F^{\frac{1}{2}} dr \right]. \quad (18)$$

Нас интересует линейная комбинация этих двух решений, являющаяся конечной в начале координат. Для ее нахождения заметим, что $F(r)$ имеет только один корень r_0 в интервале между $r=0$ и $r=\infty$. При $r < r_0$ $F(r)$ отрицательно, при $r > r_0$ $F(r)$ положительно. Решение (18) будет поэтому колебательным при $r > r_0$ и экспоненциальным при $r < r_0$. Искомое нами решение будет, таким образом, экспоненциально убывать с уменьшением r в случае $r < r_0$. Оно имеет следующий вид:

$$L_n(r) \approx F^{-\frac{1}{4}} \sin \left[\frac{\pi}{4} + \int_{r_0}^r F^{\frac{1}{2}} dr \right], \quad (19)$$

Эта формула представляет хорошее приближение для $L_n(r)$ лишь в области $r > r_0$. Асимптотическая его форма при больших r :

$$\text{const} \times \sin \left[\frac{\pi}{4} + \int_{r_0}^{\infty} \{F^{1/2} - k\} dr + k(r - r_0) \right], \quad \left(k^2 = \frac{8\pi^2 m E}{\hbar^2} \right).$$

¹⁾ Jeffreys, Proc. Lond. Math. Soc., 23 часть 6 или § 6 гл. I этой книги.

Для η_n [см. ур-ние (15) главы II] имеем в данном приближении следующее выражение:

$$\eta_n = \frac{1}{4}\pi + \frac{1}{2}n\pi - kr_0 + \int_{r_0}^{\infty} [F^{\frac{1}{2}} - k] dr. \quad (20)$$

Им можно воспользоваться для вычисления рассеяния в случае больших η_n (см. § 3. 1 главы XIII).

Для нахождения амплитуды рассеяния $f(\theta)$ мы должны просуммировать ряд

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum (2n+1) [\exp(2i\eta_n) - 1] P_n(\cos \theta). \quad (21)$$

Так как значение суммы определяется в основном членами с большими n , мы можем заменить $P_n(\cos \theta)$ его асимптотическим выражением¹⁾ для больших n :

$$P_n(\cos \theta) \sim \left[\frac{2}{n\pi \sin \theta} \right]^{\frac{1}{2}} \sin \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right].$$

Заметим, прежде всего, что расходящийся ряд

$$\sum_n (2n+1) P_n(\cos \theta) \quad (\theta \neq 0)$$

может быть тем не менее просуммирован, если рассматривать его как предел степенного ряда с таким же радиусом сходимости, и что сумма эта равняется нулю. Мы можем поэтому вычесть этот ряд из выражения (21). Для $f(\theta)$ мы получим при этом расходящийся, но суммирующийся ряд

$$f(\theta) = \sum A(n) \{ \exp[iB(n)] - \exp[iB'(n)] \}, \quad (22)$$

где

$$A(n) = -\frac{1}{2k} (2n/\pi \sin \theta)^{\frac{1}{2}}$$

$$B(n) = 2\eta_n + \left(n + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4}$$

$$B'(n) = 2\eta_n - \left(n + \frac{1}{2} \right) \theta - \frac{\pi}{4}.$$

Для того, чтобы просуммировать ряд вида

$$\sum_n A(n) \exp[iB(n)], \quad (23)$$

мы должны выяснить, имеется ли такое значение n , при котором

$$\frac{dB(n)}{dn} = 0.$$

Если такое значение $n = n_0$ существует, то вблизи n_0 будет иметься большое число членов ряда, для которых $\exp[iB(n)]$ сохраняет почти постоянное значение. Сумма ряда определяется, очевидно, в основном этой областью. Выражение (23) может быть, таким образом, заменено выражением:

$$A(n_0) \exp[iB(n_0)] \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{i\beta(n - n_0)^2\} dn,$$

где

$$\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 B}{dn^2} \right)_{n=n_0}.$$

Вычислив этот интеграл, получаем

$$A(n_0) (\pi/i\beta)^{\frac{1}{2}} \exp[iB(n_0)]. \quad (24)$$

Выясним теперь, обращается ли в нуль производная от $B(n)$ или $B'(n)$ при любом положительном значении n . Для этого должно было бы соблюдаться следующее условие:

$$2 \frac{\partial}{\partial n} \int_{r_0}^{\infty} [F^{\frac{1}{2}} - k] dr + \pi \pm \theta = 0.$$

Полагая

$$nh/2\pi = J,$$

получаем

$$\int_{r_0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial J} [2m(E - V) - J^2/r^2]^{\frac{1}{2}} dr + \frac{\pi}{2} \pm \frac{\theta}{2} = 0. \quad (25)$$

Взяв в этом выражении отрицательный знак перед последним членом, мы получим ур-ние (14), определяющее классический угловой момент электрона, рассеянного на угол θ . Легко видеть, что при выборе положительного знака не существует положительного значения J , удовлетворяющего этому уравнению. В выражении (22) вторая сумма значительно превышает, таким образом, первую сумму и мы получаем для $f(\theta)$ следующее выражение:

$$f(\theta) = - \sum_n A(n) \exp[iB'(n)].$$

С помощью (24) оно принимает вид:

$$- A(n_0) (\pi/i\beta)^{\frac{1}{2}} \exp[iB'(n_0)],$$

¹⁾ См. например *Jahnke-Emde, Funktionentafeln*, стр. 81.

где $kn_0/2\pi$ — корень ур-ния (25). Для β мы получаем

$$\frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial^2}{\partial J^2} \int_{r_0}^{\infty} [2m(E - V) - J^2/r^2]^{\frac{1}{2}} dr,$$

что с помощью ур-ния (25) может быть приведено к виду

$$\frac{\hbar}{4\pi} \frac{\partial \theta}{\partial J}.$$

Подставляя значение $A(n_0)$, получаем:

$$|f(\theta)|^2 = J \frac{\partial J}{\partial \theta} / m^2 v^2 \sin \theta$$

— классическую формулу для $I(\theta)$.

Мы видим, таким образом, что условие классического рассеяния при заданном угле θ заключается в том, чтобы n_0 было велико, где n_0 — то значение n , при котором:

$$\frac{\partial \eta_n}{\partial n} = \frac{\theta}{2},$$

и чтобы η_n также было велико при этом значении. Условие применимости формулы Борна заключается, напротив, в малости η_n для всех n .

ГЛАВА VIII

ОБЩАЯ ТЕОРИЯ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

В главах II и III мы рассмотрели вопрос о рассеянии потока частиц некоторым силовым центром. В большинстве случаев при столкновении имеет, однако, место также и некоторое обратное воздействие рассеянной частицы на рассеивающий центр.

Мы разовьем теперь более общую теорию столкновений, применимую к рассмотрению следующих вопросов:

- 1) возбуждение атомов и молекул электронным ударом;
- 2) возбуждение колебания и вращения молекул в результате столкновения их с другими молекулами;
- 3) передача возбуждения между двумя атомами или молекулами при столкновении;
- 4) возбуждение атомных ядер α -частицами или протонами.

Во всех этих случаях имеет место непосредственный обмен энергии относительного поступательного движения и внутреннего движения сталкивающихся систем. Обмен частицами между сталкивающимися системами при этом места не имеет; он осуществляется, однако, при некоторых столкновениях другого типа, также представляющих существенный интерес. К подобным столкновениям с „перераспределением“ относятся следующие процессы:

- 1) захват атомных электронов положительно заряженными частицами;
- 2) испускание протонов атомными ядрами с сопутствующим поглощением возбуждающей α -частицы;
- 3) столкновения двух молекул, приводящие к перераспределению в них электронов и ядер;
- 4) столкновения электронов с атомами, при которых имеет место обмен частицами между падающим пучком и рассеивающим атомом, причем падающий электрон поглощается, а атомный электрон выбрасывается.

Рассеянный и выбрасываемый электроны не могут быть отличены друг от друга экспериментально; волновая функция должна быть, кроме того, антисимметричной по отношению к координатам обоих электронов; эта задача нуждается поэтому в несколько иной трактовке, нежели первые три. Частный случай столкновения двух одинаковых частиц, сводящийся к задаче об одной частице, был уже рассмотрен нами в главе V.

Мы будем, таким образом, различать в дальнейшем два типа неупругих столкновений: „прямые“ и с „перераспределением“.

В силу сложности рассматриваемых явлений мы вынуждены, за исключением лишь немногих частных случаев, пользоваться приближенными методами их рассмотрения. Для столкновений, при которых относительная скорость сталкивающихся систем велика по сравнению со скоростями их внутренних движений, получение точного приближения („борновского приближения“) не представляет трудностей; общего метода, применимого также и при других условиях, однако, не существует.

§ 1. Столкновения электронов с атомами водорода. Приближение Борна

В качестве иллюстрации метода трактовки неупругих столкновений мы рассмотрим, прежде всего, простейший тип столкновений, встречающихся на практике — столкновения электронов с атомами водорода. Так как масса электрона мала по сравнению с массой протона, движением последнего можно пренебречь.

Рассмотрим пучок электронов, падающий на водородный атом, находящийся в нормальном состоянии. Предположим, что интенсивность пучка такова, что в единицу времени через единицу поперечного сечения проходит один электрон. Определим число электронов, рассеиваемых в единицу времени на угол θ внутри телесного угла $d\omega$ в результате возбуждения n -ого состояния атома. Это число $I_n(\theta) d\omega$ имеет размерность поверхности; мы будем называть его дифференциальным сечением для рассеяния внутри телесного угла $d\omega$. Полное сечение Q_n , соответствующее данному возбужденному состоянию атома, мы получим, выполнив интегрирование по всем углам

$$Q_n = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I_n(\theta) \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (1)$$

Волновое уравнение для системы, состоящей из падающего электрона и атома:

$$\left[\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + E + \frac{e^2}{r_1} + \frac{e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right] \Psi = 0, \quad (2)$$

где падающему электрону соответствует индекс 1, атомному электрону — индекс 2. Энергия E представляет собой сумму энергии E_0 атомного электрона в его нормальном состоянии и кинетической энергии $\frac{1}{2} mv^2$ падающего электрона.

Функция $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ может быть представлена в следующем виде:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\sum_n + \int \right) \psi_n(\vec{r}_2) F_n(\vec{r}_1), \quad (3)$$

где функции $\psi_n(\vec{r})$ — собственные функции водородного атома, удовлетворяющие уравнению:

$$\left(\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + E_n + \frac{e^2}{r} \right) \psi_n = 0. \quad (4)$$

Знак интегрирования в выражении (3) относится к функциям непрерывного спектра.

Подставляя функцию (3) в уравнение (2), с помощью ур-ния (4) получаем:

$$\begin{aligned} \left(\sum_n + \int \right) \psi_n(\vec{r}_2) \left\{ \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + E - E_n \right\} F_n(\vec{r}_1) = \\ = \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \end{aligned} \quad (5)$$

Умножив обе части этого уравнения на $\psi_n^*(\vec{r}_2)$ и проинтегрировав по координатам атомного электрона, имеем:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + E - E_n \right\} F_n(\vec{r}_1) = \\ = \int \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_2. \end{aligned} \quad (6)$$

При больших значениях r_1 правая часть этого равенства обращается в нуль и функция F_n удовлетворяет волновому уравнению

$$\left\{ \nabla^2 + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} (E - E_n) \right\} F_n = 0, \quad (7)$$

представляющему собой волновое уравнение свободной частицы с энергией $E - E_n$. Соответствующая длина волны равна $2\pi/k_n$, где

$$k_n^2 = 8\pi^2 m (E - E_n) / \hbar^2. \quad (8)$$

Отметим, что эта длина волны вещественна только при условии $E > E_n$, т. е. в том случае, когда электрон обладает энергией, достаточной для возбуждения n -ого состояния атома. Здесь мы будем рассматривать только такие значения n , для которых это условие выполняется.

Согласно условиям нашей задачи, электрон падает на атом, находящийся в нормальном состоянии; функция $F_0(\vec{r}_1)$ должна поэтому описывать падающую и рассеянную волны и должна иметь асимптотическую форму

$$F_0 \sim e^{ik_n z} + r^{-1} e^{ik_n r} f_0(\theta, \varphi), \quad (9)$$

Функции F_n описывают одни лишь рассеянные волны; их асимптотическая форма

$$F_n \sim r^{-1} e^{ik_n r} f_n(\theta, \varphi). \quad (10)$$

Отсюда следует, что $r^{-2} |f_n(\theta, \varphi)|^2$ определяет число электронов, возбужденных n -ое состояние, в единице объема на расстоянии r от атома. Число таких электронов, проходящих в единицу времени через единицу поперечного сечения, пропорционально $k_n r^{-2} |f_n|^2$, тогда как в падающем пучке это число пропорционально k_0 . Мы имеем, таким образом,

$$I_n(\theta) d\omega = \frac{k_n}{k_0} |f_n(\theta, \varphi)|^2 d\omega. \quad (11)$$

Асимптотическая форма функций $F_n(\vec{r}_1)$ не может быть вычислена точно. При больших скоростях столкновений легко, однако, получить приближенные формулы, воспользовавшись с этой целью методом Борна¹⁾. В этом случае возмущающее воздействие атома на падающую волну мало²⁾. В качестве нулевого приближения для Ψ мы возьмем поэтому

$$\Psi = \exp(i k_0 \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2). \quad (12)$$

Здесь $\exp(i k_0 \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1)$ — плоская волна, характеризующая движение падающего электрона в направлении единичного вектора \vec{n}_0 для случая отсутствия взаимодействия с атомом. Подставляя функцию (12) в правую часть уравнения (6), мы получаем

$$(\nabla^2 + k_n^2) F_n(\vec{r}_1) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \int \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_2} \right) \exp(i k_0 \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_2. \quad (13)$$

Решение этого уравнения в асимптотической форме (10) может быть получено с помощью метода, изложенного в § 4 главы VI. Это решение:

$$F_n(\vec{r}) = \frac{2\pi m}{h^2} \iint \frac{\exp(i k_n |\vec{r} - \vec{r}_1|)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} \exp(i k_0 \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1) \times \left(\frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (14)$$

Его асимптотический вид³⁾

$$F_n(\vec{r}) \sim \frac{2\pi m}{h^2} r^{-1} e^{i k_n r} \iint \exp\{i(k_0 \vec{n}_0 - k_n \vec{n}) \cdot \vec{r}_1\} \times \left(\frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (15)$$

¹⁾ Born, Zs. f. Physik, 37, 863, 1926 и 38, 803, 1926.

²⁾ См. § 1 главы VII.

³⁾ См. § 1 главы VII.

где \vec{n} — единичный вектор направления \vec{r} . Отсюда

$$I_n(\theta) = \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \left| \iint \exp\{i(k_0 \vec{n}_0 - k_n \vec{n}) \cdot \vec{r}_1\} \times \left(\frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 \right|^2. \quad (16)$$

Подставив выражение (14) в функцию Ψ , стоящую в правой части уравнения (6), и проинтегрировав уравнения вторично, мы можем получить следующее приближение и т. д. На практике этот метод, однако, очень кропотлив; при рассмотрении уравнения (6) гораздо удобнее исходить из более точных начальных приближений для функции Ψ ; этот вопрос будет разобран подробнее в § 3 настоящей главы.

§ 2. Общий случай столкновения двух тел

Полученные нами результаты могут быть обобщены на случай столкновения между любыми двумя атомами, молекулами или ионами. Движение системы может быть представлено как движение центра тяжести всей системы, относительное движение центров тяжести обоих тел и движение отдельных частиц, входящих в состав каждого из тел, по отношению к центру тяжести данного тела. Движение центра тяжести всей системы не представляет для нас существенного интереса и может быть выделено. Сравним получающееся при этом уравнение с уравнением (2). Оператор Гамильтона в уравнении (2) состоит из трех частей:

$$(A) \left\{ \frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla_1^2 + \frac{1}{2} m v^2 \right\} F = 0,$$

представляющей невозмущенное движение падающей частицы;

$$(B) \left\{ \frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla_2^2 + \left(E_0 + \frac{e^2}{r_2} \right) \right\} \psi = 0,$$

характеризующей внутреннее движение атомного электрона, и

$$(C) \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_{12}}$$

— энергии взаимодействия со знаком минус.

Посмотрим теперь, какой вид примут эти члены в общем случае столкновения двух тел. Для относительного движения мы имеем:

$$\left\{ \frac{h^2}{8\pi^2 M} \nabla^2 + \frac{1}{2} M v^2 \right\} F(\vec{r}) = 0, \quad (17)$$

где \vec{r} — относительные координаты, а M — приведенная масса системы, т. е.

$$M = M_1 M_2 / (M_1 + M_2),$$

где M_1, M_2 — массы обоих тел.

Для внутреннего движения:

$$\left. \begin{aligned} \{H_a(\vec{r}_a) - E_a\} u(\vec{r}_a) &= 0 \\ \{H_b(\vec{r}_b) - E_b\} v(\vec{r}_b) &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

и где H_a, H_b — операторы Гамильтона для невозмущенных атомов. Соответственно этим уравнениям мы будем иметь ряд собственных функций и собственных значений

$$\begin{matrix} u_n(\vec{r}_a), & v_m(\vec{r}_b) \\ E_a^n, & E_b^m. \end{matrix}$$

Для удобства обозначений мы не будем вводить в рассмотрение две группы функций, а каждую пару состояний обеих систем будем характеризовать одним индексом n . Волновая функция для обеих систем $\psi_n(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$ будет в таком случае представлять собой произведение двух функций $u_n(\vec{r}_a)$ и $v_m(\vec{r}_b)$, а соответствующее значение энергии E_n будет равняться сумме $E_a^n + E_b^m$. Функция ψ_n удовлетворяет уравнению

$$\{H_a(\vec{r}_a) + H_b(\vec{r}_b) - E_a - E_b\} \psi = 0. \quad (19)$$

Член, характеризующий взаимодействие, имеет вид $V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b)$. Полное волновое уравнение:

$$\left[\frac{\hbar^2}{8\pi^2 M} \nabla_r^2 - H_a(\vec{r}_a) - H_b(\vec{r}_b) + \frac{1}{2} Mv^2 + E_0 - V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) \right] \Psi = 0. \quad (20)$$

С помощью изложенного в § 1 метода легко показать, что дифференциальное сечение (в относительных координатах) для перехода всей системы из n -ого состояния в m -ое, при условии применимости первого приближения Борна, определяется выражением

$$I_{n,m}(\theta) = \frac{4\pi^3 M^2}{\hbar^4} \left| \int \int \int V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) \exp \{i(k_n \vec{n}_0 - k_m \vec{n}) \cdot \vec{r}\} \times \right. \\ \left. \times \psi_m^* \psi_n d\tau_a d\tau_b d\tau \right|^2, \quad (21)$$

где

$$k_n = 2\pi Mv/\hbar, \quad k_m^2 = \frac{8\pi^2 M}{\hbar^2} \left[\frac{1}{2} Mv^2 + E_n - E_m \right], \quad (22)$$

а v — начальная относительная скорость сталкивающихся систем. Для определения дифференциального сечения в той координатной системе, где одно из тел первоначально находилось в состоянии покоя, необходимо лишь воспользоваться классическими законами сохранения коли-

чества движения и энергии. Получающиеся при этом формулы приведены в § 5 этой главы.

Аналогичным образом легко могут быть обобщены все формулы § 1.

§ 3. Приближенные методы рассмотрения медленных столкновений

Первое приближение метода Борна оказывается справедливым лишь в том случае, когда энергия относительного движения сталкивающихся систем велика по сравнению с энергией их внутренних движений. В очень большом числе случаев это условие не выполняется; нашей задачей является нахождение методов, пригодных также и для рассмотрения подобных случаев. Мы опишем здесь два таких метода: 1) метод искаженных волн и 2) метод возмущенных функций.

§ 3.1. Метод искаженных волн. Обобщая формулу (6) § 1, мы

видим, что функции $F_n(\vec{r})$ удовлетворяют уравнениям

$$[\nabla^2 + k_n^2] F_n(\vec{r}) = \frac{8\pi^2 M}{\hbar^2} \int \int V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) \Psi \psi_n^* d\tau_a d\tau_b. \quad (23)$$

($n = 0, 1, 2, \dots$).

Полагая

$$\Psi = \sum_m F_m(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$$

и

$$V_{nm}(\vec{r}) = \int V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) \psi_n \psi_m^* d\tau_a d\tau_b, \quad (24)$$

получаем

$$(\nabla^2 + k_n^2) F_n(\vec{r}) = \frac{8\pi^2 M}{\hbar^2} \sum_m F_m V_{mn}. \quad (25)$$

Полагая в правой части уравнения (25)

$$F_0 = \exp(ik_0 \vec{n}_0 \cdot \vec{r}); \quad F_m = 0 \quad (m \neq 0),$$

мы получим приближение Борна. Предположим теперь, что недиагональные матричные элементы V_{nm} столь малы, что мы можем пренебречь всеми стоящими в правой части уравнения произведениями, за исключением члена $V_{nn} F_n$ и члена $V_{0n} F_0$, характеризующего падающую волну. Мы получим при этом ряд уравнений

$$\left[\nabla^2 + k_0^2 - \frac{8\pi^2 M}{\hbar^2} V_{00} \right] F_0(\vec{r}) = 0 \quad (26.1)$$

$$\left[\nabla^2 + k_n^2 - \frac{8\pi^2 M}{\hbar^2} V_{nn} \right] F_n(\vec{r}) = \frac{8\pi^2 M}{\hbar^2} V_{0n}(\vec{r}) F_0(\vec{r}). \quad (n \neq 0) \quad (26.2)$$

Если $V_{00}(\vec{r})$ и $V_{nn}(\vec{r})$ обладают сферической симметрией, мы можем найти формальное решение этих уравнений, удовлетворяющее гра-

ничным условиям (9) и (10), с помощью методов, изложенных в главах II и VI. В главе II, ур-ние (16), нами было получено решение ур-ния (26.1), удовлетворяющее граничному условию (9), т. е. имеющее асимптотическую форму

$$e^{ik_n z} + f(\theta) r^{-1} e^{ik_n r}. \quad (27)$$

Обозначим это решение через $F_0(\vec{r})$.

Подставив значение $F_0(\vec{r})$ в правую часть ур-ния (26.2), мы получим неоднородное уравнение для $F_n(\vec{r})$:

$$\left[\nabla^2 + k_n^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{nn}(r) \right] F_n = s_n(r, \theta, \varphi). \quad (28)$$

Задача нахождения решения этого уравнения в асимптотической форме (10) была рассмотрена нами в § 3 главы VI. Обозначая через $\mathfrak{F}_n(r, \theta)$ решение однородного уравнения

$$\left[\nabla^2 + k_n^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{nn}(r) \right] \mathfrak{F} = 0, \quad (29)$$

имеющее асимптотическую форму:

$$\mathfrak{F}_n(r, \theta) \sim e^{ik_n z} + r^{-1} e^{ik_n r} \times \text{функцию от } \theta,$$

мы получим асимптотическую форму искомого решения уравнения (26.2) в следующем виде:

$$F_n(\vec{r}) \sim -r^{-1} e^{ik_n r} \frac{2\pi M}{h^2} \int V_{0n}(\vec{r}') F_0(r', \theta') \mathfrak{F}_n(r', \pi - \Theta) d\tau', \quad (30)$$

где

$$\cos \Theta = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi'), \quad (31)$$

а θ — угол рассеяния. С помощью выражений (10) и (11) находим дифференциальное сечение, соответствующее возбуждению n -ого состояния (в относительных координатах):

$$I_n(\theta) = \frac{k_n}{k_0} \frac{4\pi^2 M^2}{h^4} \left| \int \int \int V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) \psi_0 \psi_n^* F_0(r', \theta') \times \right. \\ \left. \times \mathfrak{F}_n(r', \pi - \Theta) d\tau_a d\tau_b d\tau \right|^2. \quad (32)$$

При замене функций F_0 и \mathfrak{F}_n плоскими волнами, эта формула сводится к формуле Борна (21). Мы видим, таким образом, что этот метод принимает во внимание искажение падающей и расходящейся волн рассеивающим полем. Функция $F_0(r, \theta)$ характеризует движение электрона в поле $V_{00}(r)$ начального состояния, функция $\mathfrak{F}_n(r', \pi - \Theta)$ описывает его движение в поле $V_{nn}(r)$ возбужденного состояния.

Формула (32) применена в § 5 главы XI к рассмотрению рассеяния электронов атомами, в § 3.2 главы XIII — к вопросу о передаче возбуждения, а в § 3.5 главы XIII — к вопросу о возбуждении вращения

и колебания ядер при столкновении молекул. Она была также применена Гамовым при рассмотрении столкновений α -частиц с атомными ядрами.

§ 32. Случай точного резонанса. Применимость предыдущего метода приближения связана с малостью недиагональных матричных элементов энергии взаимодействия. При рассмотрении возбуждения n -ого стационарного состояния достаточно учесть лишь взаимодействие двух волн — падающей и упруго-рассеиваемой с волной, рассеянной после возбуждения n -ого состояния. Влияние неупругого рассеяния на упругое можно при этом не принимать во внимание. Мы можем поэтому рассматривать этот метод как одно из последовательных приближений при решении уравнений

$$\left. \begin{aligned} [\nabla^2 + k_0^2 - (8\pi^2 M/h^2) V_{00}] F_0 &= (8\pi^2 M/h^2) V_{0n} F_n \\ [\nabla^2 + k_n^2 - (8\pi^2 M/h^2) V_{nn}] F_n &= (8\pi^2 M/h^2) V_{0n} F_0, \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

в предположении что матричный элемент V_{0n} мал. Могут, однако, представиться случаи, когда достаточно учитывать взаимодействие двух со-

стояний, но матричный элемент $V_{0n}(\vec{r})$, связанный с этими состояниями, не может быть рассматриваем как малый. Подобные случаи имеют место, если состояния 0 и n находятся почти в резонансе, т. е. разность энергий между ними ΔE мала по сравнению с разностью энергий между любой другой парой состояний. Мы получаем, при этом, как и прежде, совместные ур-ния (33), однако метод последовательных приближений в общем случае оказывается неприменимым. Нахождение удовлетворительного метода решения задачи оказывается в этом случае значительно более сложным.

В частном случае точного резонанса между двумя состояниями (как, например, при переходе электрона из атома гелия в положительный ион гелия) мы можем получить точное решение; в других случаях приходится однако пользоваться более сложными методами, разработанными Лондоном и Штюкельбергом. Эти методы будут разобраны в главе XIII. Рассмотрим теперь частный случай точного резонанса.

Полагая в уравнениях (33) $k_0^2 = k_n^2 = k^2$ и считая, что поле V_{nn} совпадает с полем V_{00} , получаем уравнения

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{00}(r) \right] F_0(\vec{r}) = \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{0n}(\vec{r}) F_n(\vec{r}) \quad (34.1)$$

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{00}(r) \right] F_n(\vec{r}) = \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{0n}(\vec{r}) F_0(\vec{r}). \quad (34.2)$$

При решении этих уравнений должны быть учтены граничные условия, согласно которым для больших r

$$\left. \begin{aligned} F_0(\vec{r}) &\sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} f_0(\theta, \varphi), \\ F_n(\vec{r}) &\sim r^{-1} e^{ikr} f_n(\theta, \varphi). \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

Складывая и вычитая уравнения (34.1) и (34.2), получаем независимые уравнения:

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} \{V_{00} + V_{0n}\} \right] \{F_0 + F_n\} = 0 \quad (36.1)$$

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} \{V_{00} - V_{0n}\} \right] \{F_0 - F_n\} = 0. \quad (36.2)$$

Если функции V_{00} и V_{0n} обладают сферической симметрией, мы можем решить эти уравнения с помощью метода, изложенного в главе II. При этом мы получаем [глава II, ур-ние (17)] решения в асимптотической форме:

$$F_0 + F_n \sim \frac{1}{2} \left[e^{ikz} + e^{ikr} \frac{1}{2ikr} \sum_s (2s+1) (e^{2i\eta_s} - 1) P_s(\cos \theta) \right] \quad (37.1)$$

$$F_0 - F_n \sim \frac{1}{2} \left[e^{ikz} + e^{ikr} \frac{1}{2ikr} \sum_s (2s+1) (e^{2i\delta_s} - 1) P_s(\cos \theta) \right] \quad (37.2)$$

Фазы η_s и δ_s могут быть определены с помощью метода, рассмотренного в § 1 главы II. Решая ур-ния (37) относительно F_n , получаем

$$F_n \sim r^{-1} e^{ikr} \frac{1}{4ik} \sum_s (2s+1) (e^{2i\eta_s} - e^{2i\delta_s}) P_s(\cos \theta). \quad (38)$$

Дифференциальное сечение, соответствующее передаче возбуждения, равняется, таким образом:

$$I_n(\theta) d\omega = \frac{1}{16k^2} \left| \sum_s (e^{2i\eta_s} - e^{2i\delta_s}) (2s+1) P_s(\cos \theta) \right|^2 d\omega, \quad (39)$$

а полное сечение

$$Q_n = \frac{\pi}{k^2} \sum_s (2s+1) \sin^2(\eta_s - \delta_s). \quad (40)$$

Сравнение с соответствующими формулами главы II [ур-ния (17) и (18)] показывает, что этот метод аналогичен методу парциальных сечений, применяемому нами к рассмотрению рассеяния статическим полем сил.

Исследуем теперь условия применимости описанного в § 3.1 метода искаженных волн. Применяя его к рассматриваемой в данном параграфе задаче, получаем (так как $V_{00} = V_{nn}$) следующую формулу:

$$Q_n = \frac{8\pi^3 M^2}{h^4} \int_0^\pi \left| \int V_{0n}(r') F_0(r', \theta') \mathfrak{F}_0(r', \pi - \Theta) d\tau' \right|^2 \sin \theta d\theta. \quad (41)$$

Полагая:

$$F_0(r, \theta) = \frac{1}{k} \sum_s (2s+1) i^s e^{i\eta_s} F_0^s(r) P_s(\cos \theta)$$

$$\mathfrak{F}_0(r, \pi - \Theta) = \frac{1}{k} \sum_s (2s+1) i^{-s} e^{i\delta_s} F_0^s(r) P_s(\cos \Theta) \quad (42)$$

имеем:

$$Q_n = \frac{\pi}{k^2} \sum_s (2s+1) \left\{ \frac{16\pi^2 M}{kh^2} \int V_{0n} \{F_0^s(r)\}^2 r^2 dr \right\}^2. \quad (43)$$

Для доказательства применимости метода искаженных волн мы должны убедиться в приближенной эквивалентности выражений

$$\sin(\eta_s - \delta_s) \quad \text{и} \quad \frac{16\pi^2 M}{kh^2} \int V_{0n} \{F_0^s(r)\}^2 r^2 dr. \quad (44)$$

Если обе эти величины малы, это может быть показано с помощью метода, изложенного в § 2 главы II. Условие применимости метода искаженных волн заключается, таким образом, в малости второго из выражений (44) по сравнению с единицей. Пределы его применимости к вычислению вероятности передачи возбуждения охарактеризованы в общих чертах на рис. 13, где показано также, при каких обстоятельствах этот приближенный метод становится неточным.

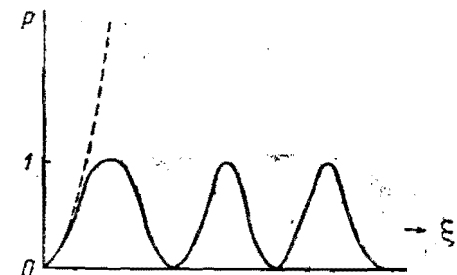


Рис. 13.

На этом рисунке вероятность P передачи энергии представлена как функция параметра ξ , характеризующего эффективное значение V_{0n} . Относительная скорость при столкновениях считается при этом постоянной. По мере возрастания ξ вероятность передачи энергии будет возрастать от 0 до 1, после чего она будет колебаться, как это показано на рисунке¹⁾. Приближенный метод искаженных волн справедлив только в области начального возрастания вероятности от 0²⁾. Он предсказывает монотонное возрастание вероятности с возрастанием ξ ; мы должны поэтому ожидать, что он будет давать чересчур большое значение вероятности процесса передачи энергии. Вероятность, как функция относительной скорости столкновения при данном значении параметра ξ , будет вести себя аналогичным образом. При малых значениях скоростей метод искаженных волн будет давать, таким образом, слишком большие значения вероятности³⁾ передачи энергии.

Эти общие соображения показывают, что если нас интересуют не слишком точные результаты, то для определения фаз $\eta_s - \delta_s$ в формуле (40) мы можем воспользоваться интегралами (44). В этом случае приближенный метод не приведет к значениям вероятности, превышающим единицу; в тех же случаях, когда $|\eta_s - \delta_s| \leq \pi/2$ (что обычно и имеет место), мы получим очень хорошее приближение.

¹⁾ Сплошная кривая.

²⁾ Пунктирная кривая.

³⁾ См. §§ 3.2, 3.3, 5.2 главы XI и § 3.3 главы XIII.

До сих пор мы рассматривали лишь случай точного резонанса. Когда резонанс не является точным, получение точного решения ур-ний (33) оказывается невозможным. Очень важно поэтому установить условия применимости приближенного метода, изложенного в § 3.1. Обобщая результаты, полученные нами выше для случая точного резонанса, мы находим, что приближенное решение, полученное с помощью метода § 3.1, справедливо в том случае, если

$$\frac{16\pi^2 M}{(hk_n)^2 h^2} \int V_{0n} F_0' F_n'' r^2 dr \ll 1 \quad (45)$$

для всех s .

Если это условие не выполняется, необходимо воспользоваться каким-либо другим методом приближения (см. § 3.32 главы XIII).

§ 3.3. Метод возмущенных волновых функций. Вычисляя вероятность возбуждения данного состояния с помощью вышеизложенных методов, мы пренебрегали взаимодействием всех состояний за исключением начального и рассматриваемого. Это пренебрежение может привести к серьезным ошибкам; до сих пор, однако, не существует вполне удовлетворительного метода, с помощью которого можно было бы описать это взаимодействие полностью. Мы рассмотрим здесь один из приближенных методов его учета. При этом мы будем исходить из стационарных волновых функций, уже возмущенных взаимодействием сталкивающихся частиц, считая, что последние как бы находятся в состоянии покоя. В этом параграфе мы ограничимся рассмотрением того случая, когда обе системы обладают сферической симметрией.

Будем, как и прежде, решать уравнение

$$\left[\frac{h^2}{8\pi^2 M} \nabla_r^2 - H_a(\vec{r}_a) - H_b(\vec{r}_b) - V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) + E \right] \Psi = 0, \quad (46)$$

принимая во внимание обычные граничные условия. Рассмотрим сперва уравнение

$$[H_a(\vec{r}_a) + H_b(\vec{r}_b) + V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) - E(r)] \chi = 0, \quad (47)$$

где \vec{r} — относительные координаты систем, являющиеся в данном случае параметрами. Мы предположим, что решение может быть найдено для любого значения r , что приведет нас к получению ряда собственных функций $\chi_n(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b)$ и собственных значений $\epsilon_n(r)$. Эти функции можно классифицировать по их поведению при больших значениях r . С помощью индекса n мы будем характеризовать то значение энергии, которое при $r \rightarrow \infty$ стремится к E_n , — n -ому собственному значению уравнения

$$[H_a(\vec{r}_a) + H_b(\vec{r}_b) - E] \Psi = 0. \quad (48)$$

Энергия $\epsilon_n(r)$ может быть представлена в следующем виде:

$$\epsilon_n(r) = E_n - \eta_n(r). \quad (49)$$

где $\eta_n \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Функции χ_n образуют ортогональную и нормированную систему по отношению к координатам \vec{r}_a, \vec{r}_b для всех значений параметра r . Мы можем поэтому представить функцию Ψ в виде:

$$\Psi = \sum_n \chi_n(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) F_n(\vec{r}). \quad (50)$$

Как и прежде, нас интересуют значения функций $F_n(\vec{r})$, имеющие асимптотический вид (10), соответствующий расходящимся волнам.

Подставляя выражение (50) в ур-ние (46) и принимая во внимание, что

$$[-H_a(\vec{r}_a) - H_b(\vec{r}_b) - V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b)] \chi_n = [\eta_n(r) - E_n] \chi_n, \quad (51)$$

получаем:

$$\sum_n \frac{h^2}{8\pi^2 M} [F_n \nabla_r^2 \chi_n + 2 \text{grad}_r F_n \cdot \text{grad}_r \chi_n + \chi_n \nabla_r^2 F_n] = \sum_n [E_n - \eta_n(r) - E] \chi_n F_n. \quad (52)$$

Умножим обе части этого уравнения на χ_n^* и проинтегрируем по пространству координат \vec{r}_a и \vec{r}_b . С помощью соотношения

$$\int \int \chi_n^* \text{grad}_r \chi_n d\tau_a d\tau_b = 0,$$

мы получаем:

$$\begin{aligned} & \frac{h^2}{8\pi^2 M} \nabla^2 F_n + [E - E_n + \eta_n(r)] F_n = \\ & = - \sum_m F_m(r) \frac{h^2}{8\pi^2 M} \int \int \chi_n^* \nabla_r^2 \chi_m d\tau_a d\tau_b - \\ & - 2 \sum_{m \neq n} \frac{h^2}{8\pi^2 M} \text{grad}_r F_m(\vec{r}) \cdot \int \int \chi_n^* \text{grad}_r \chi_m d\tau_a d\tau_b. \end{aligned} \quad (53)$$

Эти уравнения заменяют ур-ния (23), полученные нами путем разложения в ряд возмущенных волновых функций. Для нахождения приближенных решений воспользуемся методами, совершенно аналогичными применявшимся в § 3.1.

Пренебрегая всеми недиагональными матричными элементами, за исключением тех из них, которые относятся к начальному состоянию, мы получаем:

$$\begin{aligned} \nabla^2 F_0 + \left[\frac{8\pi^2 M}{h^2} \{ E - E_0 + \eta_0(r) \} + \int \int \chi_0^* \nabla_r^2 \chi_0 d\tau_a d\tau_b \right] F_0 = 0, \\ \nabla^2 F_n + \left[\frac{8\pi^2 M}{h^2} \{ E - E_n + \eta_n(r) \} + \right. \\ \left. + \int \int \chi_n^* \nabla_r^2 \chi_n d\tau_a d\tau_b \right] F_n = - F_0 \int \int \chi_n^* \nabla_r^2 \chi_0 d\tau_a d\tau_b - \\ - 2 \text{grad}_r F_0 \cdot \int \int \chi_n^* \text{grad}_r \chi_0 d\tau_a d\tau_b. \end{aligned} \quad (54)$$

Эти неоднородные уравнения могут быть решены точно таким же способом, как и ур-ния (26. 1) и (26. 2).

Для сравнения их с уравнениями, полученными нами путем разложения в ряд невозмущенных волновых функций, мы воспользуемся в качестве функций χ_n функциями, полученными из ур-ния (51) с помощью первого приближения теории возмущений (в предположении малости V). Мы получим ¹⁾:

$$\chi_n = \psi_n + \sum_{m \neq n} V_{mn} \psi_m / (E_n - E_m); \quad -r_{in} = V_{nn} + \sum_{m \neq n} V_{nm} V_{mn} / (E_n - E_m),$$

где

$$V_{nm} = \int \int V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b) \psi_m^*(\vec{r}_a, \vec{r}_b) \psi_n(\vec{r}_a, \vec{r}_b) d\tau_a d\tau_b.$$

Ур-ние (54) принимает при этом следующий вид:

$$\begin{aligned} & \nabla^2 F_n + \left[\frac{8\pi^2 M}{h^2} (E - E_n - V_{nn}(r)) + \right. \\ & \left. + \sum_{m \neq n} V_{mn} / (E_m - E_n)^2 \left\{ \nabla_r^2 + \frac{8\pi^2 M}{h^2} (E_m - E_n) \right\} V_{nm} \right] F_n = \\ & = -F_0 \left[\frac{\nabla^2 V_{0n}}{E_0 - E_n} - \sum_{m \neq n, 0} \frac{V_{mn} \nabla_r^2 V_{0m}}{(E_n - E_m)(E_m - E_0)} \right] - \\ & - 2 \text{grad}_r F_0 \cdot \left[\frac{\text{grad}_r V_{0n}}{E_0 - E_n} - \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn} \text{grad}_r V_{0m}}{(E_n - E_m)(E_m - E_0)} \right]. \end{aligned} \quad (55)$$

Пренебрегая в правой части ур-ния (55) матричными элементами, относящимися к состояниям отличным от 0 и n, получаем уравнение

$$\begin{aligned} & \nabla^2 F_n + 8\pi^2 M / h^2 (E - E_n - V_{nn}(r)) F_n = \\ & = -F_0 \nabla^2 V_{0n} / (E_n - E_0) - 2 \text{grad} F_0 \cdot \text{grad} V_{0n} / (E_n - E_0). \end{aligned}$$

Решая это уравнение с помощью метода, применявшегося нами в § 3.1 и воспользовавшись дифференциальным уравнением для F_0 , получаем для дифференциального сечения, соответствующего возбуждению, следующую формулу:

$$\begin{aligned} I_n(\theta) d\omega = & \frac{k_n}{k_0} \frac{4\pi^2 M^2}{h^4} \left| \int \left(1 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} \frac{V_{00} - V_{nn}}{k^2 - k_n^2} \right) V_{0n}(\vec{r}') \times \right. \\ & \left. \times F_0(r', \theta') \mathfrak{F}_n(r', \pi - \theta') d\tau' \right|^2. \end{aligned}$$

Мы видим, что за исключением члена

$$(V_{00} - V_{nn}) / (k^2 - k_n^2)$$

эта формула совпадает с формулой, полученной нами с помощью метода искаженных волн. Точного совпадения обеих формул и нельзя было ожидать в виду различия исходных предположений.

¹⁾ Зоммерфельд, Волновая механика.

Если $V(\vec{r}, \vec{r}_a, \vec{r}_b)$ мало, полученная формула сводится к приближению Борна для больших скоростей столкновения; если же взаимодействие велико, то описанный в этом параграфе метод применим лишь тогда, когда относительная скорость столкновений мала по сравнению со скоростью рассматриваемых внутренних движений.

Однако, в том случае, когда нахождение достаточно точных возмущенных волновых функций оказывается возможным, этот метод вычисления амплитуд рассеяния приводит к значительно более точным результатам, нежели предыдущие методы, причем взаимодействие остальных состояний до некоторой степени учитывается автоматически в начальных приближениях. Вследствие значительной трудности получения точных возмущенных функций, этот метод имел до сих пор весьма ограниченное применение. Мы обсуждаем его здесь,

Таблица 1

Условия, определяющие столкновение		Метод	Примеры	
Относительная скорость	Величина матричных элементов энергии взаимодействия			
		Диагональные элементы (V_{nn})	Недиагональные элементы (V_{0n})	
Велика по сравнению со скоростью внутренних движений	Любой величины	Любой величины	Метод Борна	Рассеяние быстрых электронов или α -частиц
Меньше или сравнима со скоростью внутренних движений	Малы	Малы	То же	
То же	Велики	Малы	Метод искаженных волн	Возбуждение молек. колеб. при столкн. с атомами
То же	Любой величины	Малы за искл. V_{0n} , где состояния 0 и n находятся почти в резонансе	Решение системы уравнений (33) (Метод Лондона)	Передача электронного возбуждения
То же	То же	Все одного порядка величины и не малы	Метод возмущенных волновых функций	Возбуждение и ионизация медленными положительными ионами

так как надеемся, что в дальнейшем он окажется весьма плодотворным. Весьма сходный метод был применен Лондоном к рассмотрению уравнений (33) § 3.2; однако при этом учитывались лишь два состояния. Это допустимо в том случае, когда оба состояния находятся почти в резонансе. Лондон применил этот метод для получения приближенных решений уравнений (33) в том случае, когда взаимодействие V_{0n} велико. Метод Лондона будет рассмотрен в дальнейшем более подробно (см. § 3.32 гл. XIII).

§ 3. 4. Заключение. Прежде чем перейти к рассмотрению столкновений, сопровождающихся перераспределением частиц, мы сравним между собой методы, пригодные для вычисления вероятностей неупругих столкновений при различных условиях. Это сравнение приведено в таблице 1 (стр. 135).

§ 4. Столкновения, сопровождающиеся перераспределением частиц

§ 4. 1. Обмен электронами. В качестве примера изучаемых под этим заглавием явлений мы рассмотрим задачу, решавшуюся нами в § 1 — задачу о столкновении электрона с атомом водорода. В § 1 мы вычислили вероятность рассеяния падающего электрона внутри данного телесного угла при возбуждении n -ого состояния. Имеется также некоторая вероятность захвата падающего электрона в n -ое состояние, сопровождающегося выбрасыванием атомного электрона. Это явление мы будем называть электронным обменом. Попытаемся вычислить его вероятность.

При вычислении вероятности непосредственного рассеяния (см. § 1) мы представляли волновую функцию $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, описывающую столкновение, в следующем виде:

$$\Psi = \left(\sum_n + \int \right) F_n(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2), \quad (56)$$

где F_0 характеризует падающую и рассеянную волны, а F_n — рассеянную волну, при условии, что энергия возбуждения n -ого состояния меньше энергии падающего электрона. Если это условие не выполняется, функция F_n убывает экспоненциально; значения n в выражении (56), соответствующие непрерывному спектру, указывают, таким образом, на возможность захвата падающего электрона и выбрасывания атомного электрона. Для вычисления вероятности этого процесса мы запишем выражение (56) в следующем виде:

$$\Psi = \left(\sum_n + \int \right) G_n(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_1). \quad (57)$$

Представляя G_n в асимптотической форме

$$G_n \sim r^{-1} e^{ik_n r} g_n(\theta, \varphi), \quad (58)$$

мы найдем вероятность захвата падающего электрона в состояние n и выбрасывания атомного электрона внутри телесного угла $d\omega$:

$$\frac{k_n}{k_0} |g_n(\theta, \varphi)|^2 d\omega. \quad (59)$$

Следует упомянуть, что рассмотрение электронов, как отличимых друг от друга, возможно только в том случае, когда спины их антипараллельны. Формулы для рассеяния неполяризованных пучков приведены в § 4. 3.

Покажем теперь, как вычисляется g_n . Волновое уравнение имеет следующий вид:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + E + \frac{e^2}{r_1} + \frac{e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right\} \Psi = 0. \quad (60)$$

В § 1 было показано, что функция F_n удовлетворяет уравнению

$$(\nabla^2 + k_n^2) F_n = \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} \int \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \right) \Psi \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_2. \quad (61)$$

Аналогичным образом, подставляя функцию (58) в уравнение (60), умножая его на $\psi_n^*(\vec{r}_1)$ и интегрируя по всем значениям x_1, y_1, z_1 , получаем:

$$(\nabla^2 + k_n^2) G_n(\vec{r}_2) = \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} \int \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_2} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_1) d\tau_1. \quad (62)$$

Это уравнение является точным; подставляя различные выражения для функции Ψ в его правую часть, с помощью методов, изложенных в § 1, мы получим решение в форме (58). Следует отметить, что приближенное решение, полученное таким образом, не является разложением приближенного решения § 1. Приближенная формула функции Ψ должна удовлетворять уравнениям

$$\left. \begin{aligned} \int \{ \Psi - F_n(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2) \} \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_2 &= 0 \\ \int \{ \Psi - G_n(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_1) \} \psi_n^*(\vec{r}_1) d\tau_1 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (63)$$

Если нас интересуют результаты, справедливые лишь при условии применимости приближения Борна, в правой части уравнения (62) полагаем:

$$\Psi = \exp(ik_0 \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \quad (64)$$

и получаем:

$$\begin{aligned} [\nabla^2 + k_n^2] G_n &= \\ &= \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} \int \left\{ \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_2} \right\} \psi_n^*(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \exp(ik_n \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1) d\tau_1 \end{aligned} \quad (65)$$

Решая это уравнение с помощью изложенного в § 4 главы VI метода, мы находим асимптотическую форму G_n :

$$G_n \sim r^{-1} \exp(ik_n r) g_n(\theta, \varphi).$$

где

$$g_n(\theta, \varphi) = -\frac{2\pi m}{h^2} \int \int \left\{ \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_2} \right\} \psi_n^*(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \exp i(k_0 n_0 \cdot \vec{r}_1 - k_n \vec{n} \cdot \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (66)$$

а \vec{n} — единичный вектор направления θ, φ . Следует отметить, что функция (64) не удовлетворяет ур-ниям (63); однако, для быстрых столкновений, когда приближение Борна справедливо, ошибка мала. Более подробное рассмотрение ур-ния (62) будет дано в § 8 главы X и в § 5 главы XI.

§ 4. 2. Общий случай столкновений, сопровождающихся перераспределением. Прежде чем рассматривать влияние тождественности электронов на формулы, определяющие интенсивность рассеяния, мы обобщим изложенный выше метод с целью применения его к общему случаю столкновений, сопровождающихся перераспределением. Нас интересует определение вероятности того, что при столкновении двух систем A и B , находящихся соответственно в состояниях n и m , произойдет перераспределение частиц, в результате чего получатся системы C и D , находящиеся в состояниях s и t .

Согласно рассмотренному выше для простейшего случая методу, мы должны записать волновое уравнение всей системы в такой форме, которая являлась бы наиболее удобной для описания конечных систем C и D . Вместо координат, относящихся к начальному состоянию, введем в рассмотрение относительные координаты $\vec{\rho}$ центров тяжести конечных систем и внутренние координаты \vec{r}_c, \vec{r}_d систем C и D , относенные к их центрам тяжести. Ур-ние (20) может быть записано в следующем виде:

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 M'} \nabla'^2 + H_c(\vec{r}_c) + H_d(\vec{r}_d) + V(\vec{r}_c, \vec{r}_d, \vec{\rho}) - E \right] \Psi = 0, \quad (67)$$

где M' — приведенная масса $\frac{M_c M_d}{M_c + M_d}$ конечных систем, H_c, H_d — операторы Гамильтона для каждой из систем C и D в отдельности, а $V(\vec{r}_c, \vec{r}_d, \vec{\rho})$ — энергия взаимодействия систем C и D .

Данную пару стационарных состояний этих систем мы будем характеризовать индексом s и будем обозначать соответствующие волновые функции и энергии $\varphi_s(\vec{r}_c, \vec{r}_d)$ и E_s . Функция $\varphi_s(\vec{r}_c, \vec{r}_d)$ представляет собой произведение двух волновых функций $u_p(\vec{r}_c)$ и $v_q(\vec{r}_d)$ отдельных систем, а E_s равно сумме соответствующих значений энергии $E_p + E_q$. Эти обозначения соответствуют обозначениям § 2.

Сравнивая уравнения (67) и (60), мы видим, что формулы § 4. 1 могут быть обобщены, если мы будем писать:

$$M' \text{ вместо } m, \quad \psi_0(\vec{r}_c, \vec{r}_d) \text{ вместо } \psi_0(\vec{r}_1) \\ - V(\vec{r}_c, \vec{r}_d, \vec{\rho}) \text{ вместо } e^2 \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right), \quad \varphi_s(\vec{r}_c, \vec{r}_d) \text{ вместо } \psi_s(\vec{r}_2).$$

В пределах применимости первого приближения Борна получаем, таким образом, дифференциальное сечение (в относительных координатах $\vec{\rho}$), соответствующее перераспределению, при котором возбуждается s -ое состояние систем C и D :

$$I_s(\theta, \varphi) d\omega = \frac{k_s'}{k} |g_s(\theta, \varphi)|^2 d\omega = \\ = 4\pi^2 M'^2 k_s' / h^4 k \left| \int \int \int V(\vec{r}_c, \vec{r}_d, \vec{\rho}) \exp \{ i(k n_0 \cdot \vec{r} - k_s' \vec{n} \cdot \vec{\rho}) \} \psi_0(\vec{r}_c, \vec{r}_d) \varphi_s(\vec{r}_c, \vec{r}_d) d\vec{r}_c d\vec{r}_d d\vec{\rho} \right|^2 d\omega, \quad (68)$$

где $k = 2\pi M v / h$, $k_s' = 2\pi M' v_s' / h$, а v и v_s' — начальная и конечная относительные скорости.

В качестве примера рассмотрим захват атомных электронов α -частицами. В этом случае \vec{r} обозначает расстояние между центром тяжести атома и α -частицей, $\vec{\rho}$ — расстояние между центром тяжести ионизованного атома и центром тяжести иона гелия, образующегося в результате поглощения электрона. В качестве внутренних координат мы имеем вначале координаты электрона по отношению к центру тяжести атома, а в конце — координаты того же электрона, взятые относительно центра тяжести иона гелия. Применение формулы (68) к этому случаю рассмотрено в § 2. 2 главы XIII.

В случае столкновений между атомами или другими тяжелыми частицами, при которых имеет место электронный обмен, можно воспользоваться методом возмущенных волновых функций (§ 3. 3), так как малая масса электрона не оказывает заметного влияния на приведенную массу атомных систем.

§ 4. 3. Принцип Паули и формулы рассеяния ¹⁾. В этом параграфе мы вернемся к рассмотрению рассеяния электронов атомами водорода. Мы ограничимся тем случаем, когда энергия падающего электрона столь мала, что возбуждение атома невозможно. В таком случае столкновение описывается волновой функцией $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, имеющей следующий асимптотический вид:

$$\Psi \sim [\exp i k z_1 + r_1^{-1} f(\theta_1) \exp i k r_1] \psi(r_2) \quad (r_1 \text{ велико}) \\ \sim [r_2^{-1} g(\theta_2) \exp i k r_2] \psi(r_1) \quad (r_2 \text{ велико})$$

^{1) Oppenheimer, Phys. Rev. 32, 361, 1928.}

Если бы электроны были отличимы друг от друга, мы могли бы сказать, что число рассеянных электронов пропорционально $|f|^2$, а число испускаемых электронов пропорционально $|g|^2$. Однако, как было показано в главе V, мы должны в этом случае пользоваться антисимметричными волновыми функциями. Волновая функция, симметричная или антисимметричная по отношению к пространственным координатам:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \pm \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

при больших r_1 имеет асимптотический вид:

$$[e^{ikz_1} + \{f(\theta) \pm g(\theta)\} r_1^{-1} e^{ikr_1}] \psi(r_2).$$

С помощью этих формул находим число электронов, рассеянных или выбитых внутри телесного угла $d\omega$:

$$|f(\theta) \pm g(\theta)|^2 d\omega.$$

Как это показано в § 5 главы V, для неполяризованных электронов эти величины должны быть взяты в отношении 1:3. Полное число электронов, рассеянных внутри телесного угла $d\omega$, равняется, таким образом,

$$\left\{ \frac{3}{4} |f-g|^2 + \frac{1}{4} |f+g|^2 \right\} d\omega. \quad (69)$$

Рассмотрим теперь случай столкновения электронов с атомами гелия. Второй атомный электрон снабдим индексом 3; в таком случае столкновение описывается волновой функцией

$$\begin{aligned} \Psi &\sim \{ e^{ikz_1} + f(\theta_1) r_1^{-1} e^{ikr_1} \} \psi(r_2, r_3) \quad (r_1 \text{ велико}) \\ &\sim g(\theta_2) r_2^{-1} e^{ikr_2} \psi(r_1, r_3) \quad (r_2 \text{ велико}) \\ &\sim g(\theta_3) r_3^{-1} e^{ikr_3} \psi(r_2, r_1) \quad (r_3 \text{ велико}) \end{aligned}$$

На основании соображений, весьма сходных с приведенными выше для случая водорода, находим, что полное число электронов, рассеянных внутри телесного угла $d\omega$, равняется

$$|f-g|^2 d\omega. \quad (70)$$

§ 5. Столкновения между двумя системами, одна из которых первоначально находилась в состоянии покоя

В нескольких параграфах этой книги (§ 3 главы V; §§ 2, 3, 4 гл. VIII) мы определяли дифференциальное сечение $I(\theta) d\omega$ для столкновений между двумя частицами, при которых их центр тяжести остается в покое. При этом мы решали уравнение:

$$\nabla^2 \psi + (\pi^2 m / h^2) \left(\frac{1}{2} m v^2 - V \right) \psi = 0,$$

где m — «приведенная масса» $\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ двух частиц, а v — их относительная скорость. Если решение имеет вид:

$$\psi \sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} f(\theta),$$

то

$$I(\theta) = |f(\theta)|^2.$$

Покажем, как определяется дифференциальное сечение в том случае, когда одна из частиц, m_1 , первоначально находилась в состоянии покоя. Обозначая дифференциальное сечение для рассеяния на угол Θ внутри телесного угла $d\Omega$ через $J(\Theta) d\Omega$, мы имеем:

$$J(\Theta) \sin \Theta = I(\theta) \sin \theta \frac{d\theta}{d\Theta},$$

где

$$\text{tg } \Theta = m_1 \sin \theta / (m_1 \cos \theta + m_2).$$

В частном случае равенства масс $\Theta = \frac{\theta}{2}$ и следовательно (если только обе частицы не являются одинаковыми; см. ур-ние (26) главы V):

$$J(\Theta) = I(2\Theta) 4 \cos \Theta.$$

ГЛАВА IX

**СТОЛКНОВЕНИЯ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С АТОМАМИ.
УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ — ПРИБЛИЖЕНИЕ БОРНА**

§ 1. Введение. Экспериментальные методы и результаты

В этой главе, а также в главах X, XI, XII и XIII мы применим изложенную в главе VIII общую теорию столкновений к подробному исследованию отдельных задач. Наибольший интерес представляют задачи, относящиеся к столкновениям электронов с атомами. В результате вычислений мы получаем дифференциальное и полное сечения, соответствующие столкновениям, при которых n -ое состояние атома возбуждается электронами определенной скорости v . Дифференциальное и полное сечения мы будем обозначать соответственно ¹⁾ через $I_n(\theta)$ и Q_n , при чем

$$2\pi \int_0^\pi I_n(\theta) \sin \theta \, d\theta = Q_n. \quad (1)$$

В случае возбуждения непрерывных энергетических уровней каждый уровень характеризуется величиной χ , удовлетворяющей следующему соотношению:

$$E_\chi = \chi^2 h^2 / 8\pi^2 m, \quad (2)$$

где E_χ — энергия данного уровня. Сечение, соответствующее возбуждению группы уровней в интервале между χ и $\chi + d\chi$, обозначается при этом через $Q_\chi d\chi$.

Дифференциальное сечение характеризует угловое распределение рассеянных электронов, тогда как полное сечение определяет полную вероятность возбуждения данного состояния.

Так как весьма существенной является близость теории к практической стороне вопроса, мы рассмотрим в первую очередь различные типы экспериментальных исследований, относящихся к столкновениям электронов с атомами, и найдем при этом соотношения наблюдаемых величин с вычисляемыми дифференциальными и полными сечениями. Опытные данные могут быть классифицированы следующим образом.

§ 1. 1. Опыты, при которых наблюдаются эффекты, обусловленные как упругими, так и неупругими столкновениями. Резуль-

таты этих опытов дают нам сведения только относительно Q , не определяя дифференциальных сечений и не разделяя эффектов, соответствующих различным конечным состояниям. Сюда относятся два типа опытов:

а) *Измерение задерживающей способности вещества для быстрых электронов.* Экспериментальные методы состоят в этом случае в исследовании пробега быстрых частиц в различных веществах. Задерживающая способность определяется потерей кинетической энергии электрона на 1 см пути в данном веществе. Обозначая энергии связанных атомных состояний через E_n , мы видим, что эта скорость потери кинетической энергии определяется уравнением

$$-\frac{dT}{dx} = N \left\{ \sum_n Q_n (E_n - E_0) + \int_{x=0}^{x_{\max}} (E_x - E_0) Q_x dx \right\}, \quad (3)$$

где E_0 — энергия нормального состояния атома, а E_x — определяется соотношением (2). N — число атомов в 1 см³ вещества, а x_{\max} связано посредством формулы (2) с максимальной энергией, которую электрон может передать атому.

В некоторых случаях этими методами можно воспользоваться для получения сведений об отдельных столкновениях; существенным является, однако, вычисление задерживающей способности вещества с помощью формулы (3), так как измерениями пробега можно воспользоваться для определения начальной энергии частицы ¹⁾.

б) *Измерение полных сечений.* Если однородный пучок электронов попадает в газ, он становится диффузным; если его первоначальная энергия превышает резонансный потенциал газа, он становится также неоднородным.

Интенсивность электронного пучка обозначим через J . В таком случае, если мы будем рассматривать каждый отклонившийся или потерявший при столкновении энергию электрон как ушедший из пучка, убыль интенсивности $|\delta J|$ при перемещении пучка на расстояние dx в газе при давлении p может быть представлена в следующем виде:

$$\delta J = -J a p dx,$$

где a зависит только от природы газа и энергии электронного пучка. Проинтегрировав это уравнение, для интенсивности пучка после прохождения им расстояния x см получим

$$J = J_0^{-apx}.$$

Величина a может быть определена путем измерения изменения обусловленного пучком тока в зависимости от длины свободного пути в газе. Подобные опыты впервые были произведены Рамзауэром ²⁾ и были применены им, а также различными другими исследователями, к измерению a для всех

¹⁾ См. главу II, § 1.

¹⁾ Blackett and Occhialini, Proc. Roy. Soc. A. 133, 699, 1933.

²⁾ Ramsauer, Ann. d. Phys. 64, 513, 1921.

простых газов, а также некоторых металлических и других паров (см. § 1 главы X).

Из определения полного сечения Q следует, что если N — число атомов в 1 см^3 газа при нормальных условиях, то

$$a = \frac{Np'}{760} \left[\sum_n Q_n + \int_0^{x_{\max}} Q_x dx \right],$$

где p' — единица давления (обычно 1 мм Hg). Если сечения Q_n , $Q_x dx$ измерены в единицах πa_0^2 , где a_0 — радиус первой боровской орбиты водорода, то при данном давлении

$$a = 3,15 \left[\sum_n Q_n + \int_0^{x_{\max}} Q_x dx \right].$$

В противоположность исследованиям задерживающей способности, рассматриваемый метод применяется лишь к электронам с малыми и средними скоростями (от 0,5 до 400 V); из вышеизложенного следует, что этот метод дает нам только значение суммы всех сечений. Для электронов с энергиями, меньшими резонансного потенциала газа, эффективными будут, однако, только упругие столкновения. Для этой области значений энергии этот метод дает, таким образом, особо важные результаты.

Интересно отметить, что описанное выше экспериментальное определение a с точки зрения классической теории не имело бы смысла, если бы сталкивающиеся системы не были определенным образом ограничены в пространстве, а наблюдаемые значения зависели бы от определенных понятия столкновения, даваемого размерами целей приемного аппарата. В квантовой теории эта трудность отсутствует, так как сечения Q определены при условии, что рассеивающее силовое поле достаточно быстро убывает с расстоянием — условию, которому удовлетворяют все атомные поля. Это обстоятельство рассмотрено подробно в конце § 1 главы II. Подтверждающие его экспериментальные данные приведены в § 1 главы X.

В связи с этими опытами следует упомянуть также метод Таунсенда¹⁾.

Интерпретация наблюдений основана в этом случае на сложной классической теории движения электронов в газах, и применение ее ограничивается условиями, при которых эта теория справедлива — т. е. очень низкими скоростями столкновений (для большинства газов меньше 5 вольт). Таким образом, этот метод дает нам сведения относительно вида Q_0 для значительно меньших скоростей электронов, нежели метод Рамзауера и получаемые с его помощью результаты представляют значительный интерес.

§ 1. 2. Опыты, в которых различные типы столкновений — упругие и неупругие — исследуются в отдельности. Результаты этих исследований дают нам сведения об относительных значениях различ-

ных сечений Q_n при данной скорости падения и о дифференциальных сечениях $I_n(\theta)$ как функциях угла рассеяния, а также и об изменении любого из сечений Q_n с изменением скорости столкновения. Абсолютные значения величин при этом обычно не измеряются, они могут быть, однако, определены с помощью опытов, описанных выше.

Методы исследования могут быть подразделены на три класса.

а) *Электрические методы.* В опытах этого типа производится непосредственное измерение углового распределения рассеянных электронов или измерение относительных вероятностей возбуждения путем измерения силы токов, соответствующих рассеянным электронам. В случае ионизирующих столкновений абсолютное сечение для ионизации $\int_0^{x_{\max}} Q_x dx$

может быть измерено путем наблюдения положительного тока ионов, создаваемого однородным пучком электронов, пропускаемых через газ при низких давлениях.

б) *Оптические методы.* В этом случае однородный электронный пучок пропускается через газ или пар; измеряется интенсивность света различных длин волн, испускаемого атомами, возбужденными электронным пучком. Интенсивность испускаемого света, соответствующая переходу атома газа из состояния n в состояние m , будет пропорциональна величине $Q_n A_{nm}$, где A_{nm} — вероятность оптического перехода из состояния n в состояние m . Изменение интенсивности света данной длины волны с изменением скорости возбуждающих электронов определяет зависимость Q_n от скорости столкновения, так как A_{nm} не зависит от метода возбуждения. Если A_{nm} может быть вычислено, можно также сравнить между собой величины сечений Q_n для различных n .

Этот метод имеет то преимущество, что он является более чувствительным, нежели электрический метод; с его помощью могут быть исследованы эффективные сечения Q_n для очень высоких возбужденных состояний.

Мы видим, таким образом, что имеющийся экспериментальный материал в достаточной степени разнообразен, чтобы иллюстрировать теоретические соображения и проверять их применимость. С другой стороны, теоретические соображения проливают свет на многие интересные и существенные для физика-экспериментатора явления. Прежде чем перейти к подробным вычислениям дифференциальных и полных сечений, мы остановимся вкратце на выбранном нами порядке изложения. В первую очередь мы рассмотрим упругие столкновения, воспользовавшись для этого простейшими формулами — первым приближением теории Борна (см. § 1 главы VII). Затем мы исследуем пределы применимости этих формул и усовершенствуем теорию (глава X) методами Факсена и Хольстмарка, изложенными в главе II. В некоторых частных случаях мы введем затем дальнейшие уточнения, воспользовавшись представлениями об электронном обмене. Все эти вычисления не связаны с неупругими столкновениями; в более строгой теории нельзя, однако, рассматривать упругие столкновения, не учитывая в то же время столкновений неупругих; в связи с этим мы рассмотрим вкратце вопрос о взаимо-

1) Townsend, Phil. Mag. 42, 873, 1921.

действии неупруго рассеянных волн с упруго рассеянными волнами. Мы рассмотрим далее (глава XI) неупругие столкновения. Как и в случае упругих столкновений, мы начнем при этом с исследования первого приближения Борна (являющегося достаточно точным для вычисления задерживающей способности вещества для быстрых частиц), а затем рассмотрим усовершенствованную теорию для случая более медленных частиц.

§ 2. Упругое рассеяние. Первое приближение Борна

В § 1 главы VII было показано, что дифференциальное сечение $I(\theta)$ для упругого столкновения электрона скорости v со сферически симметричным полем потенциала $V(r)$ в пределах применимости первого приближения теории Борна определяется следующим выражением¹⁾:

$$I(\theta) = \left| \frac{8\pi^2 m}{h^2} \int_0^\infty \frac{\sin Kr}{Kr} V(r) r^2 dr \right|^2. \quad (K = 4\pi m v \sin \frac{\theta}{2} / h). \quad (4)$$

Нами была также получена формула, дающая соотношение между функцией (4) и коэффициентом рассеяния рентгеновых лучей²⁾. Вычислим теперь $I(\theta)$ для того случая, когда $V(r)$ характеризует поле атома.

Если $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z)$ — волновая функция атома (с атомным номером Z) мы имеем³⁾

$$V(r) = -e^2 \int \left(\frac{Z}{r} - \sum_{n=1}^Z \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_n|} \right) |\psi_0(\vec{r}_1, \dots)|^2 d\tau_1 \dots d\tau_Z. \quad (5)$$

Волновые функции ψ_0 известны аналитически лишь для очень небольшого числа атомов; для большинства атомов вычисление $V(r)$ связано поэтому с применением сложных численных методов расчета; мы рассмотрим сперва те случаи, когда ψ_0 известно.

§ 3. Рассеяние атомами водорода и гелия

Для водорода

$$\psi_0 = (\pi/a_0^3)^{1/2} e^{-r/a_0}. \quad (6)$$

Для гелия с достаточной степенью точности можно воспользоваться волновой функцией, полученной Хиллераасом⁴⁾ на основании вариационного метода:

$$\psi_0 = (\pi Z^3/a_0^3) e^{-Z(r_1+r_2)/a_0}, \quad (Z = 1,69) \quad (7)$$

¹⁾ См. главу VII, ур-ние (12).

²⁾ См. главу VII, ур-ние (18).

³⁾ См. главу VIII, § 1. 2.

⁴⁾ *Hylleraas, Zs. f. Phys.* 54, 347, 1929.

Подставляя эти функции в ур-ние (5) и интегрируя, получаем

$$\left. \begin{aligned} V(r) &= -e^2 \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{a_0} \right) e^{-2r/a_0} \quad \text{для водорода} \\ &= -2e^2 \left(\frac{1}{r} + \frac{Z}{a_0} \right) e^{-2Zr/a_0} \quad \text{для гелия} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Подставляя эти значения в выражение (4) и интегрируя, находим:

$$I(\theta) = \frac{64\pi^4 m^2 e^4 A (2\lambda^2 + K^2)^2}{h^4 (\lambda^2 + K^2)^4}, \quad (9)$$

причем для водорода

$$A = 1, \quad \lambda = 2/a_0,$$

для гелия

$$A = 4, \quad \lambda = 3,36/a_0.$$

Таблица I

Интенсивности рассеяния для гелия и водорода

$\frac{ka_0}{Z} \sin \frac{\theta}{2}$	$\frac{V_{\text{вольт}}}{Z} \sin \frac{\theta}{2}$	$\{Z^2 I(\theta)/A\} \cdot 10^{18} \text{ см}^2$
0	0	27,6
0,03	0,11	27,3
0,05	0,18	27,2
0,10	0,37	26,7
0,20	0,74	24,3
0,30	1,10	21,3
0,40	1,47	17,7
0,50	1,84	14,3
0,60	2,21	11,1
0,70	2,59	8,62
0,80	2,94	6,61
0,90	3,31	5,08
1,00	3,68	3,87
1,20	3,82	2,30
1,40	4,46	1,48
1,60	5,10	0,921
1,80	6,10	0,590
2,00	7,36	0,397
2,50	9,20	0,168
3,00	11,0	0,083
3,50	12,9	0,046
4,00	14,7	0,027
4,50	16,6	0,017
5,00	18,4	0,011

$Z = 1$ } для водорода
 $A = 1$ }

$Z = 1,69$ } для гелия
 $A = 4$ }

С помощью этой формулы легко может быть вычислено угловое распределение электронов, упруго рассеянных атомами водорода и гелия. В таблице I приведены значения $I(\theta)$ для этих атомов как функции $\sin \frac{\theta}{2}$.

Полное упругое сечение имеет при этом следующий вид:

$$Q_0 = 2\pi \int_0^\pi I(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{1024 A \pi^5 m^2 z^4 (3\lambda^4 + 18\lambda^2 k^2 + 28k^4)}{3h^4 \lambda^2 (\lambda^2 + 4k^2)^3} \quad (10)$$

Как это следует из рис. 14, Q_0 является монотонной функцией от $k = \frac{2\pi m v}{h}$.

§ 3. 1. Сравнение с опытными данными. Измерения угловых распределений электронов, упруго рассеянных атомами гелия, были произведены многими исследователями¹⁾ для электронов с энергиями от 1,8 до 700 V. На рис. 15 экспериментальные кривые для электронов с энергиями, превышающими 50 V, сравнены с величинами, вычисленными с помощью формулы (9). Так как экспериментальные данные не определяют абсолютных значений коэффициента рассеяния, на этом рисунке выбран такой масштаб, при котором наблюдаемые и вычисленные значения совпадают для электронов с энергией 700 V.

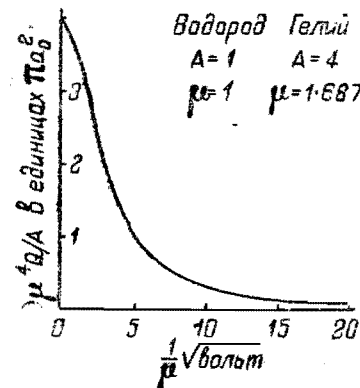


Рис. 14.

При значениях энергии, превышающих 100 V, имеет место очень хорошее согласие с опытными данными в широком интервале углов рассеяния. При очень малых и очень больших углах рассеяния наблюдается, однако, заметное расхождение между теоретическими и экспериментальными данными. Для электронов, энергия которых меньше 500 V, при больших значениях углов рассеяния, рассеяние почти не зависит от угла, вместо того, чтобы убывать с возрастанием последнего. Это обстоятельство обусловлено искажением падающей волны атомным полем (см. § 5. 1).

При малых углах рассеяния наблюдаемое изменение интенсивности при изменении угла превышает вычисленное значение. Это, по всей вероятности, обусловлено поляризацией атома падающим электроном; подробнее этот вопрос будет рассмотрен в § 10 главы X.

При энергиях меньших 100 V для любых углов согласие с опытными данными является неудовлетворительным. Причины этих отклонений будут рассмотрены в § 5. 1 этой главы, а также в § 9 главы X.

¹⁾ Dymond and Watson, Proc. Roy. Soc. A., 122, 571, 1929; Mc Millen, Phys. Rev., 36, 1034, 1930; Bullard and Massey, Proc. Roy. Soc. A., 133, 637, 1931; Ramsauer and Kollath, 12, 529, 1932; Werner, Proc. Roy. Soc. A., 134, 202, 1932; Hughes, Mc Millen and Webb, Phys. Rev., 41, 154, 1932; Mohr and Nicoll, Proc. Roy. Soc. A., 138, 229, 469, 1932.

Формула Борна (9) приближенно справедлива, таким образом, для электронов с энергией превышающей 100 V, рассеянных атомами гелия; она не является, однако, вполне точной для электронов, энергия которых меньше 500 V.

Для случая атомного водорода соответствующие опыты были произведены Харвеллем¹⁾; при этом оказалось, что наблюдаемая интенсивность

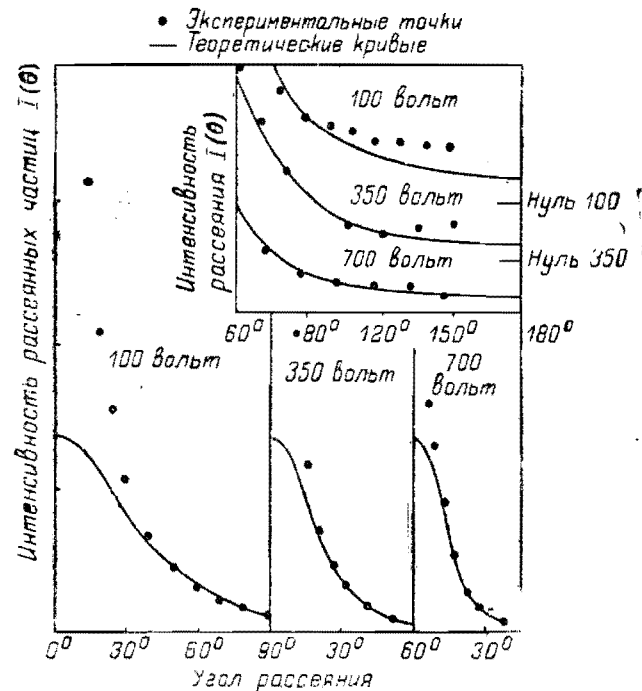


Рис. 15.

рассеяния для электронов с энергией 120 и 180 V с возрастанием угла убывает значительно быстрее, нежели вычисленные выше значения. Это и неудивительно в виду трудности подобного рода опытов. Экспериментальный материал, имеющийся для случая молекулярного водорода, будет рассмотрен в § 3 главы XII в связи с вопросом о рассеянии электронов молекулами.

§ 4. Вычисление $I(\theta)$ и Q_0 для сложных атомов

Для определения поля $V(r)$ атомов, отличных от H и He, существует два метода: метод самосогласованного поля, разработанный Хартри²⁾, и статистический метод Томаса-Ферми³⁾, трактующий атомные электроны как вырожденный газ. Более точным является, конечно, метод

¹⁾ Harnwell, Phys. Rev., 34, 631, 1929.

²⁾ Hartree, Proc. Camb. Phil. Soc., 24, 89, 111 и 426, 1927.

³⁾ Thomas, Ibid., 23, 542, 1926; Fermi, Zs. f. Phys., 48, 73, 1928.

Хартри. Применение его к столь сложным атомам, как, например ртуть, является, однако, весьма затруднительным. Для элементов, атомный номер которых превышает 37, атомные поля по этому методу до сих пор вычислены не были. Для более сложных атомов можно воспользоваться методом Томаса-Ферми; в этом случае он дает более точные результаты, нежели для легких атомов, так как является методом статистическим.

Определив по методу Хартри значения потенциалов $V(r)$, мы можем найти путем численного интегрирования по формуле (4) дифференциальные сечения для столкновений электронов с различными атомами. Впервые метод самосогласованного поля был применен для вычисления факторов $I^{(1)}$, характеризующих рассеяние рентгеновых лучей кристаллами; соответствующие величины для рассеяния электронов могут быть найдены с помощью соотношения:

$$I(\theta) = \frac{e^4}{4m^2v^4} (Z - I)^2 \operatorname{cosec}^4 \frac{\theta}{2}, \quad (11)$$

полученного нами в главе VII [ур-ние (8)]. В таблице II приведены значения $I(\theta)$ как функции от $V^{\frac{1}{2}} \sin \frac{\theta}{2}$ (где V — энергия электрона в вольтах, а θ — угол рассеяния), вычисленные этим способом для различных атомов. Во всех случаях результирующее угловое распределение монотонно убывает с возрастанием угла рассеяния. При данной скорости столкновения быстрота убывания рассеяния с возрастанием угла тем больше, чем меньше атомный номер рассматриваемого элемента.

§ 4. 1. Применение метода Томаса-Ферми. Быстрые столкновения²⁾. В методе Томаса-Ферми мы пользуемся переменными φ и x , определяемыми следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} Z\epsilon\varphi &= rV(r) \\ x &= 2^{\frac{13}{3}} 3^{-\frac{2}{3}} \pi^{\frac{4}{3}} m\epsilon^2 h^{-2} Z^{\frac{1}{3}} r. \end{aligned} \quad (12)$$

Функция φ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \varphi^{\frac{3}{2}} x^{-\frac{1}{2}}$$

и граничным условиям

$$\varphi(0) = 1, \quad \varphi(\infty) = 0.$$

Отношение x/r определяет величину, обратную "радиусу атома" и является монотонной функцией от Z .

¹⁾ James and Brindley, Zs. f. Krystall., 78, 470, 1931.
²⁾ Bullard and Massey, Proc. Camb. Phil. Soc., 26, 556, 1930.

Таблица II
 Значения $I(\theta)$, вычисленные по методу Хартри

(Для получения значений сечений в абсолютных единицах эти данные должны быть умножены на $5,96 \times 10^{-23}$)

$\frac{\theta}{\lambda} \cdot 10^{-8}$	1,1	1,0	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,1
$\sqrt{\text{вольт}} \sin \frac{\theta}{2}$	13,47	12,25	11,02	9,80	8,57	7,35	6,12	4,90	3,67	2,45	1,22
Li	5	7	10	15	24	36	64	112	275	900	6400
Be	8	12	17	23	37	61	108	225	655	2760	12100
B	13	17	24	35	59	100	193	425	1180	4220	22500
C	18	25	35	53	88	148	295	655	1780	5610	19600
N	23	32	48	74	123	222	415	860	1960	4900	14400
O	31	45	67	104	172	295	540	1020	2080	4550	8100
F	40	56	85	130	210	361	645	1240	2560	4900	14400
Ne	49	72	106	156	256	420	700	1220	2180	3900	4900
Na	59	85	126	188	289	470	772	1290	2280	4900	18200
Mg	70	100	149	220	327	515	830	1890	3400	7200	22500
Al	83	114	164	237	361	558	900	1600	3400	10200	40000
Si	94	130	188	275	400	610	1000	1880	4150	13200	70000
P	104	144	204	289	436	675	1160	2220	5300	15600	67600
S	116	160	222	324	480	770	1340	2600	6130	17400	57600
Cl	125	173	243	346	530	850	1520	3130	7410	20300	57600
A	142	193	268	380	580	930	1660	3380	7100	18200	48400

Функция φ была табулирована Ферми, как функция от x ; с помощью табличных значений и ур-ния (12) могут быть, таким образом, найдены значения $V(r)$. Подставив их в выражение для $I(\theta)$, мы получаем

$$I(\theta) = \left\{ \frac{3^{\frac{4}{3}} h^2 Z^{\frac{1}{3}}}{2^{\frac{17}{3}} \pi^{\frac{2}{3}} \varepsilon^2 u} \int_0^{\infty} \varphi(x) \sin \mu x dx \right\}^2, \quad (13)$$

$$\mu = 3^{\frac{2}{3}} h v \sin \frac{\theta}{2} / (2^{\frac{17}{3}} \pi^{\frac{1}{3}} \varepsilon^2 Z^{\frac{1}{3}}).$$

Так как $\varphi(x)$ от Z не зависит, мы видим, что $I(\theta) Z^{-\frac{2}{3}}$ зависит только от μ , т. е. только от $Z^{-\frac{1}{3}} v \sin \frac{\theta}{2}$. Таким образом, если мы знаем

$I(\theta) Z^{-\frac{2}{3}}$ как функцию от $Z^{-\frac{1}{3}} v \sin \frac{\theta}{2}$, мы можем вычислить $I(\theta)$

для всех атомов. В общем случае это может быть осуществлено только путем численного интегрирования; однако в частном случае больших μ , соответствующем большим скоростям столкновения, мы можем получить приближенное явное выражение для $I(\theta)$. Оно имеет следующий вид¹⁾:

$$I(\theta) \sim \frac{Z^2 \varepsilon^4 \operatorname{cosec}^4 \frac{\theta}{2}}{4m^2 v^4} \left\{ 1 - 6,4 \cdot 10^{-4} \left(\frac{\operatorname{cosec} \frac{\theta}{2}}{\beta} \right)^2 Z^{\frac{1}{2}} \right\},$$

где $\beta = \frac{v}{c}$.

Отсюда следует, что для быстрых столкновений формула Резерфорда должна давать очень хорошее совпадение с опытными данными. Второй член, характеризующий влияние атомных электронов, не имеет ничего общего с часто вводимой в рассмотрение поправкой, состоящей в том, что в формулу Резерфорда вместо Z^2 подставляют $Z^2 + Z$; следует упомянуть, однако, что при получении этих результатов неупругие столкновения нами во внимание не принимались. Для рассеяния электронов с энергией 70 киловольт атомами золота поправка²⁾ к формуле Резерфорда составляет 25% для углов рассеяния в 20°.

Для осуществления численного интегрирования необходимо протабулировать $I(\theta) Z^{-\frac{2}{3}}$ как функцию от μ (т. е. от $Z^{-\frac{1}{3}} v \sin \frac{\theta}{2}$); впер-

вые это было сделано для некоторых значений μ Митчелом¹⁾, вычисления которого были дополнены затем Буллардом и Мессе²⁾ для всей области значений μ от 0 до 15. Результаты этих вычислений приведены в таблице III.

Таблица III

Интенсивности рассеяния, вычисленные по методу Томаса-Ферми

μ	$\frac{\sqrt{\text{вольт}} \sin \theta/2}{Z^{\frac{1}{3}}}$	$I(\theta) / Z^{\frac{2}{3}}$
		$\times 10^{-18} \text{ см}^2$
0	0	2160
0,03	0,062	2120
0,05	0,104	2010
0,1	0,208	1460
0,2	0,41	678
0,3	0,62	344
0,4	0,83	202
0,5	1,04	122
0,6	1,25	79
0,7	1,46	54
0,8	1,66	44,0
0,9	1,87	29,6
1,0	2,08	18,7
1,5	3,12	6,43
2,0	4,16	2,52
3,0	6,25	0,61
5,0	10,4	0,089
6,0	12,5	0,046
7,0	14,6	0,026
8,0	16,7	0,016
9,0	18,7	0,010
10,0	20,8	0,0064
12,0	25,0	0,0032
15,0	31,2	0,0013

Сравнивая эти значения с величинами, полученными по методу Хартри, мы видим, что для тяжелых атомов оба метода дают эквивалентные результаты, однако для более легких атомов, в частности для атомов с аномальными размерами, например для благородных газов и щелочных металлов, между ними наблюдаются расхождения. Статистический метод не принимает, конечно, во внимание индивидуальных различий между атомами и не может быть поэтому вполне удовлетворительным образом применен к ним.

Путем вторичного численного интегрирования могут быть найдены значения полных сечений. Легко показать, что $QZ^{-\frac{2}{3}}$ зависит только

¹⁾ Bullard and Massey, Proc. Camb. Phil. Soc., 26, 556, 1930.

²⁾ Релятивистские эффекты при этом не учитывались.

¹⁾ Mitchell, Proc. Nat. Acad. Sci., 15, 520, 1929.

²⁾ Bullard and Massey, Proc. Camb. Phil. Soc., 26, 556, 1930.

от $vZ^{-\frac{1}{3}}$. Эта функция изображена на рис. 16; существенно отметить, что эффективное сечение является монотонной функцией скорости.

§ 5. Применимость первого приближения Борна

Прежде чем сравнивать результаты этих вычислений с опытными данными, необходимо остановиться на вопросе об области их применимости.

Точная формула, определяющая дифференциальное сечение, имеет следующий вид [см. ур-ние (17) главы II]:

$$I(\theta) d\omega = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) (e^{2i\eta_n} - 1) P_n(\cos \theta) \right|^2 d\omega. \quad (14)$$

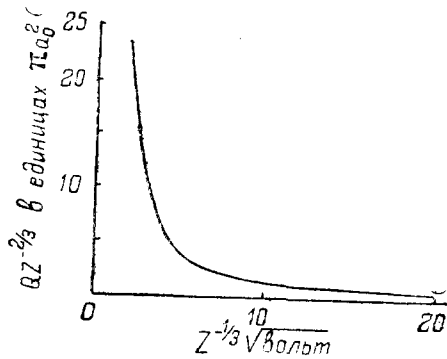


Рис. 16.

В § 2 главы VII было показано, что формула Борна может быть представлена в виде:

$$I(\theta) d\omega = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \zeta_n P_n(\cos \theta) \right|^2 d\omega, \quad (15)$$

где

$$\zeta_n = -\frac{4\pi^3 m}{h^2} \int_0^{\infty} V(r) [J_{n+\frac{1}{2}}(kr)]^2 r dr. \quad (16)$$

Обе эти формулы дали бы тождественные результаты, если бы выражение $\exp(2i\eta_n) - 1$ могло быть заменено через $2i\zeta_n$. Это можно сделать, однако, только в случае малых η_n ; в § 2 главы II было показано, что при этих условиях ζ_n является хорошим приближением к η_n . Условие применимости формулы Борна имеет, таким образом, следующий вид:

$$\frac{4\pi^3 m}{h^2} \int_0^{\infty} V(r) [J_{n+\frac{1}{2}}(kr)]^2 r dr \ll 1 \text{ для всех } n. \quad (17)$$

Этот критерий является, однако, чересчур жестким, так как во многих случаях выражение (14) может содержать большое число членов и приближенное выражение (15) может дать точное значение всех их за исключением нескольких первых. Можно сказать таким образом, что если условие (17) удовлетворяется, то в применимости этого приближения не может быть сомнений; но даже и в том случае, когда оно не удовлетворяется, расхождение не всегда велико. Вообще, если условие (17) не очень заметно нарушается при $n=0$ и если ряд содержит большое число членов — расхождение будет малым.

Принимая во внимание эти соображения, рассмотрим вопрос о применимости формул (15) и (16) к случаю рассеяния электронов атомами. Для простейшего случая столкновений с водородом и гелием, с помощью выражения (8) для $V(r)$ и приближенной формулы (16) находим:

$$\zeta_n = \frac{4\pi^2 m e^2}{k h^2} \left(1 - \frac{Z}{2} \frac{\partial}{\partial Z} \right) Q_n \left(\frac{2Z^2 + k^2 a_0^2}{k^2 a_0^2} \right), \quad (18)$$

где Q_n — шаровая функция второго рода. Это дает:

$$\zeta_0 = \frac{2\pi^2 m e^2}{k h^2} \left\{ \lg \left(1 + \frac{k^2 a_0^2}{Z^2} \right) + \frac{k^2 a_0^2}{Z^2 + k^2 a_0^2} \right\}.$$

Таблица IV

Сравнение точных и приближенных значений фаз

Гелий		η_0		η_1		η_2		Число членов
ka_0	Вольты	Точное значение	По Борну	Точное значение	По Борну	Точное значение	По Борну	
1,05	15	1,360	0,565	0,052	0,042	0,0065	0,0054	1
1,92	50	1,093	0,734	0,186	0,148	0,0411	0,0329	4
3,00	122	0,898	0,731	0,272	0,224	0,0946	0,0769	6
4,00	215	0,784	0,687	0,301	0,264	0,1304	0,1130	8
5,30	340	0,696	0,638	0,308	0,274	0,1524	0,1378	10

Водород		η_0		Число членов
ka_0	Вольты	Точное значение	По Борну	
1,0	13,5	0,905	0,596	1
2,0	54	0,694	0,602	3
3,0	122	0,568	0,534	5
4,0	215	0,490	0,472	6
5,0	340	0,432	0,422	8

В таблице IV приведены ¹⁾ численные значения η и ζ при различных значениях энергии падающих электронов. Для более точного определения области применимости первого приближения Борна приведены также числа членов, требующиеся для получения полной формулы рассеяния (14). Эти числа определены на основании соображений, изложенных в § 2 главы II, где показано, что роль члена n -ого порядка мала, если:

$$\frac{8\pi^2 m}{h^2} V(r) \ll \frac{n(n-1)}{r^2},$$

при условии

$$kr \sim n + \frac{1}{2}.$$

Мы увидим в дальнейшем, что хотя приближенная формула для фаз нулевого порядка справедлива только с точностью 10% для значений энергии, меньших 340 V в случае гелия и 100 V в случае водорода, можно ожидать, что для более низких значений энергии, например 100 V для гелия и 75 V для водорода разложение (15) окажется достаточно точным. Это предположение находится в согласии с опытными данными, рассмотренными в § 3.1 этой главы и в § 3 главы XII для случая молекулярного водорода.

Для тяжелых атомов фазы могут быть вычислены приближенно путем численного интегрирования выражения (16) с помощью метода Ферми или Хартри. При этом мы получаем следующие значения ζ_0 для тяжелых благородных газов при двух различных значениях энергии:

Таблица V

	Вольты	ζ_0	n	Вольты	ζ_0	n
Неон	20	2,5	2	2000	2,0	10
Аргон	30	5,6	4	3000	2,9	20
Криптон	48	8,8	5	4800	4,65	30
Ксенон	64	11,5	6	6400	6,1	40

ⁿ — приближенное число членов в рядах, определяющих парциальные сечения

В этой таблице указаны также приближенные числа членов в выражении (14) для различных случаев. Из этих данных следует, что формула Борна остается справедливой до 1000 V для неона и аргона и возможно также и для криптона, тогда как случай ксенона является более сомнительным. В случае очень тяжелых атомов, например атомов

ртути, $\zeta_0 = 8,0$ для электронов с энергией 8000 вольт, откуда следует, что первое приближение теории Борна может быть справедливым лишь для электронов с очень большой энергией. Следует однако отметить здесь, что для того чтобы формула была точной, вовсе не необходимо, чтобы само ζ_0 было меньше единицы.

§ 5.1. Более высокие приближения метода Борна. Более высокие приближения теории Борна были рассмотрены Мёллером ¹⁾ и Дистелом ²⁾ с целью определения пределов применимости первого приближения, однако ни одним из этих авторов не были получены явные выражения даже для второго приближения. Дистел рассмотрел также вопрос о влиянии неупругого рассеяния на рассеяние упругое ³⁾; он показал, что для случая водорода ряды, встречающиеся в теории Борна, сходятся только в том случае, когда скорость v падающего электрона велика по сравнению с орбитальной скоростью u атомного электрона. Эти ряды фактически представляют собой разложение по степеням $\frac{u^2}{v^2}$. Для тяжелых атомов v должно было бы относиться к орбитальной скорости K -электронов, однако рассеяние этими двумя электронами мало по сравнению с рассеянием, обусловленным ядром и остальными электронами, поэтому при исследовании применимости первого приближения можно воспользоваться более низким значением орбитальной скорости.

Простой метод повышения точности первого приближения непосредственно вытекает из сравнения приближенных значений фаз, вычисленных, как это показано выше, с точными значениями фаз. Возвращаясь к рассмотрению таблицы IV, мы видим, что вплоть до значений $\eta_0 > 0,5$ точные значения фаз нулевого порядка не отличаются заметным образом от достаточно приближенных значений. Значения фаз их точно определяются, таким образом, приближенными формулами даже в том случае, когда приближение:

$$\exp(2i\zeta_n) - 1 \approx 2i\zeta_n$$

является незаконным. Вычисляя с помощью приближенного метода большие значения фаз и исправляя формулу (15) на отклонение $\exp(2i\zeta_n)$ от $2i\zeta_n$, мы получим, таким образом, более точный результат.

Это дает нам следующую формулу:

$$I(\theta) d\omega = \left| V I_b(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \{ \exp(2i\zeta_n) - 1 - 2i\zeta_n \} P_n(\cos \theta) \right|^2 d\omega, \quad (19)$$

где I_b — интенсивность рассеяния, определяемая формулой Борна.

Отсюда следует, что отклонения от формулы Борна становятся впервые заметными при больших значениях углов, так как I_b быстро убывает.

¹⁾ Møller, Zs. f. Phys., **66**, 513, 1930.

²⁾ Distel, Ibid., **74**, 785, 1932.

³⁾ См. также § 10 гл. X.

¹⁾ Они вычислены Макдугаллом (Macdougall, Proc. Roy. Soc. A., **136**, 549, 1932).

вадет с увеличением θ , тогда как поправочные члены слабо зависят от углов, определяясь в основном несколькими шаровыми функциями низших порядков. Влияние поправок оказывается наиболее заметным при больших значениях θ .

В частности, в случае гелия мы видим (см. таблицу IV), что формула Борна нуждается в исправлении для члена нулевого порядка даже при энергии электрона равной 340 V. Формула (19) приобретает в этом случае следующий вид:

$$I(\theta) d\omega = \left| \sqrt{I_b(\theta)} + \frac{1}{2ik} (e^{2iz_0} - 1 - 2iz_0)^2 \right|^2 d\omega. \quad (20)$$

Для этих относительно высоких скоростей $I_b(\theta)$ очень мало при больших значениях углов, и рассеяние определяется в этом случае

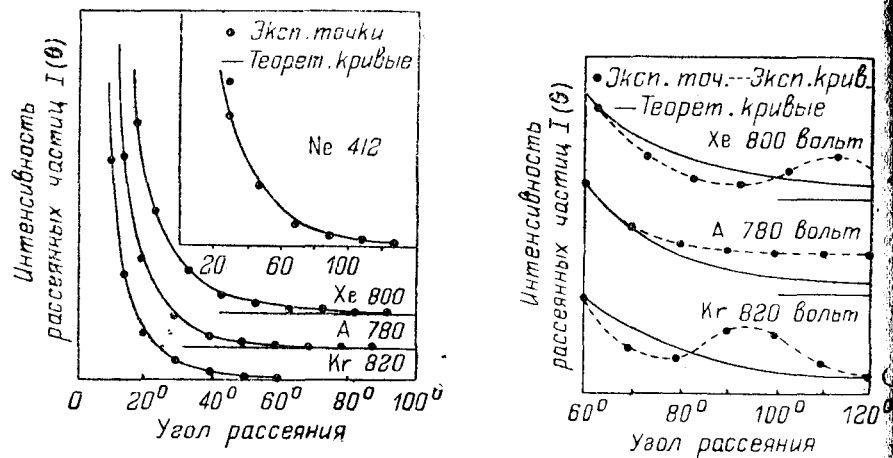


Рис. 17.

вторым членом выражения (20). Этот член от величины угла не зависит; рассеяние должно, таким образом, отличаться от предсказываемого теорией Борна тем, что при больших углах оно остается почти постоянным вместо того, чтобы равномерно убывать. Рис. 17 подтверждает эти соображения как качественно, так и количественно.

§ 5. 2. Сравнение с опытными данными. Для благородных газов применимость формулы Борна может быть проверена с помощью работ Арно¹⁾. Найдено, что в неоне эта формула справедлива для энергии до 400 V для всей исследованной области углов ($15^\circ - 120^\circ$), тогда как для аргона, криптона и ксенона она оказывается применимой только для углов, меньших 80° . При больших углах рассеяния для этих тяжелых газов наблюдаются небольшие отклонения от теоретических данных. Это показано на рис. 17. По мере уменьшения энергии падающих электронов интервал углов, в котором формула Борна ока-

зывается справедливой, уменьшается. Так, например, в неоне при 200 V для углов, превышающих 90° , она уже несправедлива. Согласие теоретических и опытных данных является, таким образом, в общем весьма удовлетворительным. Дальнейшее подтверждение теории дает измерение интенсивностей при диффракции электронов от металлической фольги, причем распределение интенсивности хорошо согласуется со значениями, вычисленными с помощью вышеизложенных методов¹⁾. Применимость первого приближения Борна для очень быстрых электронов подтверждается также опытами Вирля по рассеянию электронов в многоатомных газах, рассмотренными в § 4 главы XII.

¹⁾ Arno, Proc. Roy. Soc. A., 133, 615, 1931.

¹⁾ Mott, Nature, 124, 986, 1929; Mark und Wierl, Zs. f. Phys., 60, 741, 1930; Thomson, The Wave Mechanics of Free Electron, 1931.

ГЛАВА X

УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ АТОМАМИ

§ 1. Эффекты Рамзауэра и Таунсенда

Как это было показано в § 5 главы IX, первое приближение метода Борна неприменимо к рассмотрению столкновений медленных электронов с атомами; получаемые в этом случае опытные данные ясно указывают на необходимость построения более строгой теории.

В 1921 году, исследуя свободные пробеги очень медленных (от 0,75 до 1,1 V) электронов в различных газах, Рамзауэр¹⁾ нашел, что в аргоне длины свободных путей таких электронов значительно превышают величины, вычисляемые на основании кинетической теории газов. Распространение этих наблюдений на более широкий интервал скоростей²⁾ привело к обнаружению удивительной изменчивости сечения с изменением скорости электронов. Было найдено, что эффективное сечение (обратно пропорциональное длине свободного пути) атомов аргона возрастает с уменьшением скорости до тех пор, пока энергия электронов не становится меньше 10 V. При дальнейшем уменьшении энергии электронов оно уменьшается, достигая малых значений, обнаруженных в предшествовавших опытах. Независимо от этих наблюдений, Таунсенд и Бэйли³⁾ исследовали зависимость свободного пробега от скорости для электронов с энергиями между 0,2 и 0,8 V и показали, что максимум длины свободного пути лежит около 0,39 вольта. Эта величина была также получена в более поздней работе Рамзауэра и Коллата⁴⁾.

Вслед за опубликованием этих классических опытов было исследовано поведение большого количества газов и паров для широкого интервала скоростей электронов⁵⁾. Результаты, полученные для некоторых одноатомных газов и паров, приведены на рис. 18, характеризующем зависимость эффективного сечения от скорости электронов. Как известно, эффективное сечение обратно пропорционально средней длине свободного пути.

Характерной чертой кривых зависимости сечения от скорости является большое разнообразие их размеров и формы, а также заметное

¹⁾ Ramsauer, Ann. d. Phys., **64**, 513, 1921.

²⁾ Ramsauer, там же, **66**, 545, 1921.

³⁾ Bailev, Phil. Mag., **43**, 593, 1922; **44**, 1033, 1922.

⁴⁾ Ramsauer und Kollath, Ann. d. Phys., **3**, 536, 1929.

⁵⁾ См., например, обзор Kollath'a в Phys. Zs., **31**, 983, 1931.

сходство поведения аналогичных атомов, как например, атомов тяжелых благородных газов и паров щелочных металлов. Вначале все эти явления не имели удовлетворительного объяснения, но с появлением квантовой механики тотчас же возникло предположение, что эти эффекты — дифракционного характера. Бором было предложено общее объяснение паличия минимального значения сечения, наблюдаемого в благородных газах вблизи 0,7 V. Поле атома благородного газа убывает с расстоянием значительно быстрее, нежели поле какого-либо другого атома, поэтому электронная волна большой длины, падая на такой атом, попадает в область быстро возрастающего коэффициента преломления, и следовательно — область быстрого убывания длины волны. Если в области, занимаемой рассеивающим полем, укладывается целое число длин волн, то падающая волна полем не искажается. Это обстоятельство будет рассмотрено подробнее в § 2.

Убедительное экспериментальное доказательство волновой природы рассматриваемых явлений было получено в результате измерения угловых распределений упруго рассеянных электронов. Впервые подобные измерения были произведены Буллардом и Мессеи для электронов с энергией между 4 и 40 V, рассеянных атомами аргона¹⁾. В отличие от кривых борновского типа, характеризующихся монотонным убыванием интенсивности при увеличении угла рассеяния, кривые, полученные Буллардом и Мессеи, обладают максимумами и минимумами. На рис. 19 приведен ряд кривых для аргона с увеличением скорости электронов от 1,1 до 780 V; эти кривые постепенно приближаются к кривым, даваемым первым приближением теории Борна. Для быстрых электронов (42 — 780 V) измерения были произведены Арно²⁾, для медленных

¹⁾ Bullard and Massey, Proc. Roy. Soc. A., **130**, 579, 1931.

²⁾ Arnot, Proc. Roy. Soc. A., **133**, 615, 1931.

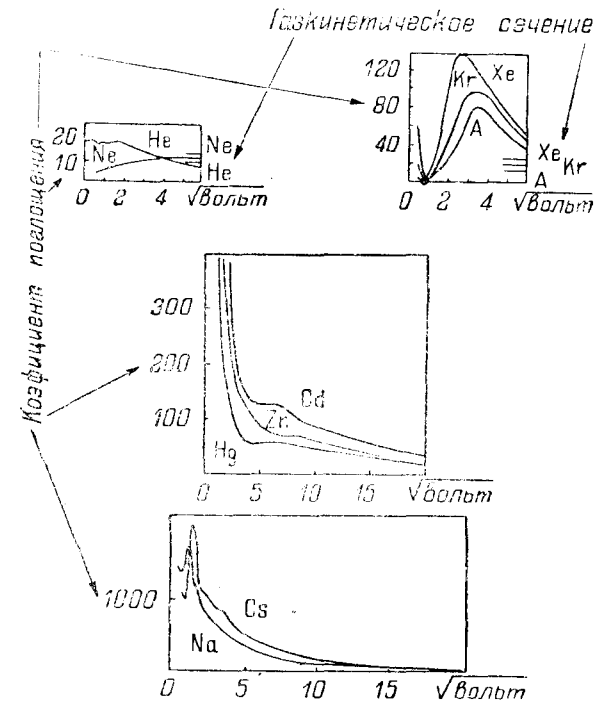


Рис. 18.

(1,1 и 2,8 V) — Рамзауером и Коллатом ¹⁾. В последнее время эти опыты были осуществлены для различных газов и для широкого интервала энергий электронов; найдено, что в большинстве случаев максимумы и минимумы соответствуют некоторому определенному интервалу скоростей ²⁾. Для легких газов, например водорода и гелия, этот интервал мал (до 15 V в гелии и 6 V в водороде), тогда как для ртути заметны

максимумы и минимумы наблюдаются вплоть до наиболее высоких значений скоростей (800 V). Отсюда следует, что волновая природа электронов играет существенную роль в более широкой области скоростей, нежели это можно было бы предположить на основании измерения эффективных сечений.

Интересно сравнить опытные данные об угловом распределении рассеянных электронов с теоретическими результатами (гл. VII, § 1. 1), согласно которым функция $2\pi I(\theta) \sin \theta$, дающая число электро-

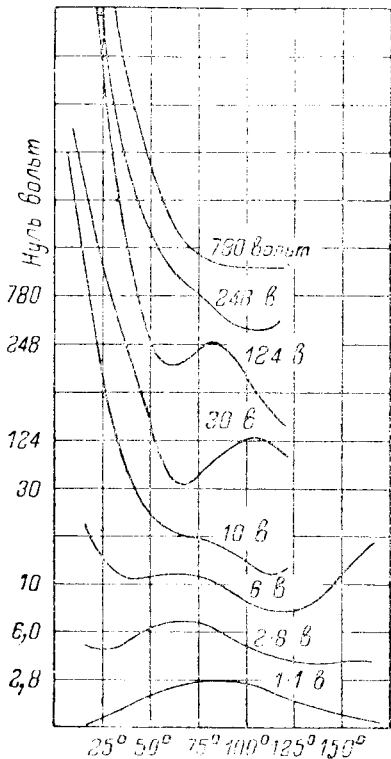


Рис. 19.

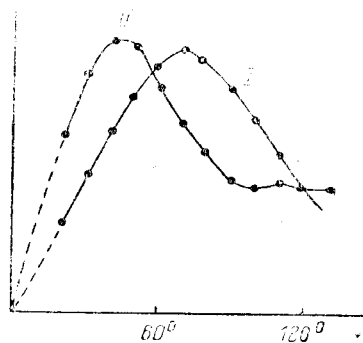


Рис. 20.

нов, рассеянных атомом на единицу телесного угла, стремится к нулю при уменьшении θ до нуля. На рис. 20 приведены две экспериментальные кривые, иллюстрирующие рассеяние на единицу угла; опыты находятся в очевидном согласии с теоретическими заключениями ³⁾.

¹⁾ Ramsauer und Kollath, Ann. d. Phys., 12, 529, 1932.

²⁾ Bullard and Massey, Proc. Roy. Soc. A., 130, 579, 1931 и 133, 637, 1931; Arnot, Proc. Roy. Soc. A., 130, 655, 1931; 133, 615, 1931 и 140, 334, 1933; Pearson and Arnquist, Phys. Rev., 37, 970, 1931; Ramsauer und Kollath, Ann. der Phys., 12, 529 и 837, 1932; Hughes and McMillen, Phys. Rev., 39, 585, 1932 и 41, 39, 1932; Tate and Palmer, Phys. Rev., 40, 731, 1932; Mohr and Nicoll, Proc. Roy. Soc. A., 138, 229, 1932 и 138, 469, 1932; Jordan and Brode, Phys. Rev., 43, 115, 1933.

³⁾ Кривая I относится к электронам с энергией 6 V, рассеянным атомами неона, кривая II — к электронам с энергией 7 V, рассеянным молекулами азота.

§ 2. Теория рассеяния медленных электронов. Метод частичных сечений

Для построения теории рассеяния медленных электронов атомами мы вернемся к рассмотрению общей теории, изложенной нами в главе VIII. Волновая функция Ψ , характеризующая в данном случае систему: атом + падающий электрон, была представлена нами в виде

$$\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}) = \left(\sum_n + \int \right) \psi_n(\vec{r}_a) U_n(\vec{r}),$$

где $\psi_n(\vec{r}_a)$ — волновая функция, характеризующая n -ое возбужденное состояние атома. Было показано, что функция $F_n(\vec{r})$ удовлетворяет уравнению

$$(\nabla^2 + k_n^2) F_n = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \int V(\vec{r}, \vec{r}_a) \Psi(\vec{r}_a, \vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}_a) d\tau_a,$$

где $V(\vec{r}, \vec{r}_a)$ — энергия взаимодействия падающего и атомного электронов, а k_n — волновое число уходящей электронной волны, равное $\frac{2\pi m v_n}{h}$.

Если пренебречь электронным обменом, то упругое рассеяние полностью определяется функцией F_0 , удовлетворяющей уравнению:

$$(\nabla^2 + k^2) F_0(\vec{r}) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \int V(\vec{r}, \vec{r}_a) \Psi(\vec{r}_a, \vec{r}) \psi_0^*(\vec{r}_a) d\tau_a. \quad (1)$$

Для того чтобы решить это уравнение, мы должны подставить в правую его часть какое-либо приближенное значение функции Ψ . Так, например, в главе IX при получении приближения Борна мы пренебрегали всеми рассеянными волнами и заменяли Ψ функцией $\psi_0(\vec{r}_a) \exp(i\vec{k}\vec{r})$. В приближении, исследованию которого посвящена эта глава, мы будем пренебрегать всеми волнами, за исключением упруго рассеянной; в правой части уравнения (1) мы положим соответственно:

$$\Psi = \psi_0(\vec{r}_a) F_0(\vec{r}).$$

Мы получаем, таким образом,

$$\left\{ \nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00}(\vec{r}) \right\} F_0(\vec{r}) = 0, \quad (2)$$

где

$$V_{00}(\vec{r}) = \int V(\vec{r}, \vec{r}_a) \psi_0 \psi_0^* d\tau_a.$$

Это уравнение характеризует движение падающего электрона в статическом поле атома, причем V_{00} — потенциал этого поля. В рассматриваемом нами приближении задача свелась, таким образом, к определению рассеяния, обусловленного статическим полем рассматриваемого атома. Метод вычислений, примененный к этому случаю, описан в § 1

главы II. В дальнейшем мы будем отбрасывать индекс 0 в F_0 и V_0 , так как вопроса о неупругом рассеянии мы в этой главе касаться не будем.

Если мы представим функцию F в виде ряда:

$$F = \sum_s F_s(r) P_s(\cos \theta)$$

и подставим ее в уравнение (2), то функция $F_s(r)$ будет удовлетворять уравнению

$$\frac{d^2}{dr^2}(rF_s) + \left[k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V(r) - \frac{s(s+1)}{r^2} \right] (rF_s) = 0. \quad (3)$$

Решение этого уравнения имеет, как это было показано в главе II, следующий асимптотический вид:

$$rF_s \sim A_s \sin \left(kr - \frac{1}{2} s\pi + \eta_s \right),$$

где η_s — фазовая постоянная. Амплитуда $f(\theta)$ рассеянной волны определяется выражением

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{s=0}^{\infty} (2s+1) [\exp(2i\eta_s) - 1] P_s(\cos \theta), \quad (4)$$

а дифференциальное сечение для упругого рассеяния внутри телесного угла $d\omega$:

$$I(\theta) d\omega = |f(\theta)|^2 d\omega.$$

Полное сечение определяется интегралом:

$$Q = 2\pi \int_0^\pi I(\theta) \sin \theta d\theta.$$

Мы получаем, таким образом:

$$Q = \sum_s Q_s,$$

где

$$Q_s = 4\pi k^{-2} (2s+1) \sin^2 \eta_s. \quad (5)$$

Мы будем называть Q_s парциальным сечением порядка s .

Вычисление сечений $I(\theta)$ и Q связано, таким образом, с вычислением сдвигов фаз для различных рассеянных волн. Первое приближение Борна оказывается справедливым только при малом η_s , так что $\sin \eta_s$ никогда не проходит через максимум, имеющий место при $\eta_s = \frac{\pi}{2}$. В этом приближении не следует, таким образом, ожидать колебательного характера Q_s как функции энергии; дело, однако, обстоит иначе, если η_s может превышать $\frac{\pi}{2}$.

§ 3. Сходимость рядов парциальных сечений

В § 2 главы VII было доказано, что ряд парциальных сечений сходится, а в § 2 главы II был описан метод определения числа существенных членов этого ряда. Этот метод основывается на том обстоятельстве, что парциальное сечение Q_s соответствует частицам с квантованным угловым моментом $\{s(s+1)\}^{1/2} h/2\pi$. Было показано, что при

$$V(r) \ll \frac{s(s+1) h^2}{r^2 8\pi^2 m}$$

и

$$kr \sim \{s(s+1)\}^{1/2} \quad (k = 2\pi mv/h),$$

можно пренебречь всеми фазами η_n , для которых $n > s$. Сходимость будет, таким образом, наилучшей для легких атомов и медленных электронов. В частности, при очень малых скоростях рассеяние полностью определяется членами нулевого порядка. Для легких атомов ряд парциальных сечений сходится быстро для всех скоростей, лежащих ниже области применимости приближения Борна. Для таких тяжелых атомов, как ртуть, имеется, однако, промежуточная область скоростей, где приближение Борна является уже неудовлетворительным, а сходимость ряда парциальных сечений также очень медленная. Пригодный для таких случаев метод будет рассмотрен нами в § 3.1 главы XIII.

§ 4. Нижний предел скорости

Как это было упомянуто выше, Рамзауер, Таунсенд и Бэйли нашли, что для столкновения атомов благородных газов с очень медленными электронами (0,5 V) эффективное сечение значительно меньше своего газокинетического значения. Для таких медленных электронов сечение Q , как мы видели, равно практически сечению нулевого порядка Q_0 . Для объяснения экспериментальных данных мы должны, поэтому, выяснить — при каких условиях $Q_0 \rightarrow 0$, если длина волны λ стремится к бесконечности. Впервые эта задача была решена Факсе́ном и Хольтсмарком¹⁾, к изложению метода которых мы и перейдем.

Плоская волна e^{ikz} может быть разложена по шаровым функциям; первый член такого разложения равен $\sin kr/kr$. Мы видели, что рассеянная волна обладает сферической симметрией; вне атома мы можем поэтому описывать ее функцией $c_0 r^{-1} e^{ikr}$. В тех внешних точках, где r значительно меньше длины волны, полная волновая функция имеет вид:

$$\frac{\sin kr}{kr} + c_0 r^{-1} e^{ikr}. \quad (6)$$

¹⁾ Faxen und Holtzmark, *Zs. f. Phys.*, 45, 307, 1927.

Волновую функцию во внутренних областях атома обозначим $F_0(r)$; она представляет собой решение дифференциального уравнения (3), конечное в начале координат и определенное с точностью до произвольного постоянного множителя. Величина F_0'/F_0 однозначно определяется, таким образом, уравнением (3) для всех r .

Представим себе, что атом пространственно ограничен поверхностью шара $r=R$. В таком случае можно определить c_0 , связанную с функцией (6) и F_0 при $r=R$. Мы получаем при этом:

$$\frac{\cos kR + c_0 i k e^{i k R}}{k^{-1} \sin kR + c_0 e^{i k R}} = \left[\frac{(r F_0)'}{r F_0} \right]_{r=R}$$

Правая часть этого выражения представляет собой известную величину; мы можем таким образом определить c_0 . Нам интересуют случаи больших длин волн ($k \rightarrow 0$). Решая это уравнение и полагая $k \rightarrow 0$ получаем:

$$\lim_{k \rightarrow 0} c_0 = -R^2 F_0' / (R F_0' + F_0).$$

Таким образом, если при очень больших длинах волн F_0' равняется нулю на границе атома, c_0 равно нулю и эффективное сечение также обращается в нуль.

Этот результат представляет собой математическое оформление боревского объяснения эффекта Рамзауера — Таунсенда, рассмотренного нами в § 1, так как если это условие удовлетворяется, влияние атомного поля сказывается в появлении дополнительных колебательных членов в волновой функции падающей частицы. Этот эффект может наблюдаться лишь для атомных полей, достаточно сильных для создания дополнительного корня волновой функции. Он не может поэтому иметь место для полей отталкивания. Тяжелые благородные газы являются наиболее эффективными в смысле создания эффекта Рамзауера — Таунсенда в силу того, что поля их атомов очень резко ограничены пространственно и обуславливают быстрое изменение длины волны нулевого порядка, тогда как волны более высокого порядка оказываются неэффективными.

Факсён и Хольтемарк¹⁾ проверили эту теорию путем вычисления функций F_0 для различных полей. Они нашли, что атом водорода чересчур мал, для того чтобы вызвать эффект Рамзауера, однако поля, сходные с полем атома аргона, могут оказаться эффективными в этом отношении.

§ 5. Общее применение метода парциальных сечений

Мы показали, что теория способна объяснить наблюдаемые малые значения эффективных сечений для столкновений; попытаемся теперь применить ее ко всем остальным случаям столкновений медленных электронов с атомами.

Мы должны объяснить следующие экспериментальные факты:

1) Величина эффективного сечения изменяется в широких пределах, причем максимум, наблюдаемый для щелочных металлов, в 100 раз превышает максимум, наблюдаемый в песне.

2) Угловые распределения рассеянных электронов обладают резкими максимумами и минимумами.

3) Кривые зависимости эффективного сечения от скорости электронов для разных столбцов периодической таблицы имеют различную форму.

Мы воспользуемся следующими свойствами вычисленных нами фаз:

(а) Для любого атомного поля η_s монотонно убывает с возрастанием s .

(б) η_s мало, если, при

$$kr \sim s + \frac{1}{2},$$

$$\frac{8\pi^2 m}{h^2} V(r) \ll s(s+1)/r^2.$$

Из соотношения (б) следует, что для медленных столкновений ряды парциальных сечений сходятся очень быстро; основную роль при этом играют парциальные сечения Q_s , для которых $\eta_s \approx \frac{\pi}{2}$.

Максимальное значение, которым может обладать парциальное сечение порядка s равно:

$$Q_s^{\max} = \frac{4\pi}{k^2} (2s+1).$$

Отсюда следует, что чем меньше скорость и чем больше значение s , при котором фаза η_s достигает значения $\frac{\pi}{2}$, тем больше

будет эффективное сечение. Возвращаясь к условию (б), мы видим, что наибольшее эффективное сечение будет соответствовать атомам, поля которых распространяются на большое расстояние (например, поля щелочных металлов). Если мы воспользуемся эмпирическими правилами, данными Слейтером¹⁾ для нахождения эффективного заряда ядра щелочных металлов и определим диаметр атома как расстояние, на котором плотность заряда $r^2 |\psi|^2$ внешней электронной оболочки имеет максимум, мы получим значения радиусов r_0 различных атомов, приведенные в табл. I (стр. 168).

Мы приводим также значения kr_0 , соответствующие электронам энергией 13 и 0.5 V. С помощью критерия (б) мы находим, что для калия нужно учесть по крайней мере 7 членов в ряде (4) и эффективное сечение может в этом случае превышать $50\pi a_0^2$, тогда как для неона требуется только один член, и эффективное сечение не превышает $10\pi a_0^2$.

¹⁾ Loc. cit.

¹⁾ Slater, Phys. Rev., 36, 57, 1930.

Таблица I

	r_0 в атомных единицах	kr_0 1)	
		13 V	0,5 V
Li	2,3	2,3	0,46
Ni	4,1	4,1	0,82
K	6,1	6,1	1,22
Zn	3,1	3,1	0,62
He	0,6	0,6	0,12
Ne	0,7	0,7	0,14
A	1,3	1,3	0,26
Kr	1,7	1,7	0,34

При $k = 0,2/a_0$ (0,54 V) для калия сечение может равняться $300\pi a_0^2$, но для неона или гелия оно попрежнему не может значительно превышать $10\pi a_0^2$. Для объяснения широкой области изменения наблюдаемых значений эффективных сечений не представляется, таким образом, никаких трудностей. Ясно также, что с помощью этого метода можно получить максимумы и минимумы, наблюдающиеся в угловом распределении, характеризующем формулой (4). Основную роль играют те члены рядов, для которых $\eta_s \approx \frac{\pi}{2}$. Угловое распределение выражается, таким образом, следующей функцией:

$$I(\theta) = \text{const} \cdot \{P_s(\cos \theta)\}^2,$$

которая имеет s минимумов. Последние особенно резко выражены при малых скоростях столкновений, где требуется лишь небольшое число членов ряда (4) и весовой множитель $2s + 1$ оказывается особенно существенным. В аргоне для электронов с энергией 30 вольт угловое распределение точно определяется выражением $\{P_2(\cos \theta)\}^2$. Вычисленные значения фаз при этой скорости

$$\eta_0 = 2\pi + 0,885; \eta_1 = 4,831; \eta_2 = 1,983; \eta_3 = 0,374; \eta_4 = 0,159.$$

Следует упомянуть, что эти данные приводятся только для иллюстрации; действительные же эффекты, соответствующие сумме парциальных сечений, могут быть весьма сложными, особенно для тяжелых атомов. Диффракция волн от сферических предметов является значительно более сложным процессом, нежели диффракция от решетки или какой-либо другой симметричной системы.

Объяснение третьей отмеченной выше особенности оказывается, однако, не столь простым. Квази-периодическое поведение парциальных

1) k измеряется в единицах $1/a_0$.

сечений обусловлено характером функции $\sin \eta_s$. При малых скоростях электронов для наиболее легких атомов существенную роль играет только фаза нулевого порядка. Для некоторых атомных полей эта фаза близка к $\frac{\pi}{2}$ и соответствующее сечение будет проходить через максимум.

Для некоторых более тяжелых атомов фаза достигает значения $\frac{3\pi}{2}$, обуславливая такой же максимум сечения нулевого порядка и т. д. Для некото-

рых атомов с промежуточными свойствами заметное значение будет иметь η_1 и т. д. Таким образом можно было бы объяснить некоторую квази-периодичность в ходе эффективных сечений; мы должны, однако, показать, что эта периодичность следует законам периодической таблицы. Впервые это было

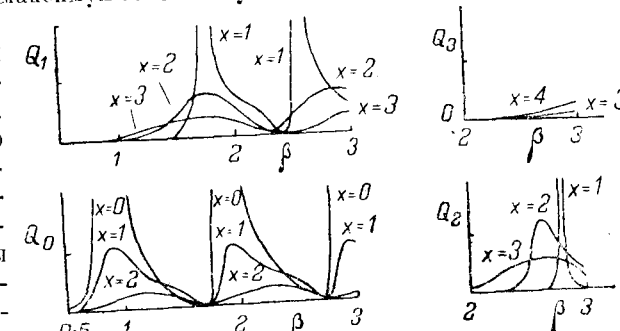


Рис. 21.

осуществлено Эллисом и Морз 1) с помощью упрощенной атомной модели. Атомное поле они характеризовали потенциалом:

$$V = 2Z \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right) \quad (r \leq r_0)$$

$$= 0 \quad (r \geq r_0). \quad (7)$$

В этом случае оказывается возможным аналитическое решение уравнения (3). Для иллюстрации периодического хода эффективных сечений были определены две величины: x и β , где

$$\beta^2 = Zr_0/2, \quad x = kr_0.$$

Первая из них зависит только от характера атомного поля, вторая является также функцией от скорости падающего электрона. Эллис и Морз показали, что эффективные сечения квази-периодичны по отношению к β , причем период равняется единице. Это показано на рис. 21, где парциальные сечения, соответствующие различным значениям x , даны как функции β . Если мы воспользуемся приближенными значениями атомных радиусов, определенными по методу Слейтера (см. таблицу II)

Таблица II

Литий	1,36	Гелий	0,77
Натрий	2,54	Неон	1,73
Калий	3,51	Аргон	2,68
		Криптон	3,66

1) Allis und Morse, Zs. f. Phys., 70, 567, 1931.

и значением постоянной Z , соответствующим совпадению потенциала (7) данными Слейтера, мы найдем, что период β приблизительно равняется единице для всей периодической таблицы. Это можно видеть из таблицы II где приведены значения β для некоторых элементов.

Наиболее легкие элементы ведут себя до некоторой степени аномально; это подтверждается также опытными фактами (см. рис. 18 этой главы).

§ 6. Количественные приложения метода парциальных сечений

Количественное применение вышеизложенной теории впервые было осуществлено Хольтмарком ¹⁾ для случая рассеяния электронов в аргоне; мы рассмотрим, однако, прежде всего результаты, полученные Эллисом

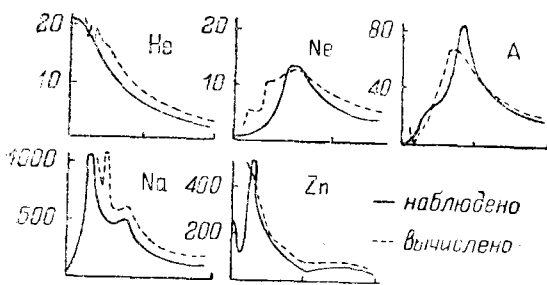


Рис. 22.

и Морз с помощью их упрощенной модели.

Выбрав значения параметров β и r_0 , с помощью правила Слейтера мы получаем обычно хорошее согласие с наблюдаемыми значениями эффективных сечений. На рис. 22 экспериментальные кривые сравнены с теоретическими. Значения β и r_0 , применившиеся при получении

последних, слегка отличны от значений, получаемых с помощью формул Слейтера; различие это, однако, не велико. В таблице III значения параметров, при которых наблюдается наилучшее совпадение с опытными данными, сравнены со значениями Слейтера; те и другие измерены в атомных единицах.

Получаемое между ними согласие является весьма удовлетворительным и не оставляет никаких сомнений относительно справедливости теоретического объяснения эффектов Рамзауэра — Таупсенда, даваемого квантовой механикой. Функции, применяющиеся нами для описания атомного поля, дают, однако, лишь весьма грубое приближение, в особенности для очень медленных столкновений ²⁾. В этих случаях атомные поля могут играть весьма существенную роль также и на расстояниях, превышающих радиус r_0 .

С помощью метода Хартри Хольтмарк получил очень хорошее согласие с экспериментальными значениями сечений для аргона, вычисляя фазы η_n путем численного интегрирования дифференциальных уравнений.

¹⁾ Holtmark, Zs. f. Phys., 55, 437, 1929.

²⁾ Морз произвел вычисления для поля:

$$V = Z \exp(-2r/r_0) r^{-1}$$

и получил при этом весьма сходные результаты. Существенную роль играют те же величины β и r_0 . (Morse, Rev. Mod. Phys., 4, 577, 1932).

Таблица III

Атом	β		r_0	
	По Слейтеру	Из эффективных сечений	По Слейтеру	Из эффективных сечений
Гелий . . .	0,77	0,80	0,6	0,55
Неон . . .	1,73	1,71	0,7	0,75
Аргон . . .	2,68	2,7	1,3	1,4
Натрий . . .	2,54	2,55	4,1	4,25
Цинк . . .	3,77	3,78	3,1	3,14

Более строгая проверка теории может быть произведена путем сравнения вычисленных и наблюдаемых угловых распределений. Последние являются значительно более чувствительными к неточностям теории. На рис. 23 кривые углового распределения, полученные Буллердом и Мессером и Рамзауэром и Коллатом для аргона, сравнены с кривыми, вычисленными с помощью значений фаз η_n , определенных по методу Хольтмарка.

Для электронов с энергией 30 и 12 В согласие является очень хорошим. Интересно отметить, что при меньших значениях энергии согласие с кривыми, вычисленными с помощью упрощенной модели Морзе и Эллиса, рассмотренной в § 5, является далеко не столь удовлетворительным. При очень малых скоростях электронов наблюдения Рамзауэра и Коллата не согласуются с теорией даже в том случае, когда вычисления атомного поля произведены по методу Хартри.

Точные значения фаз были вычислены только для трех сортов атомов: для криптона (Хольтмарком) и для гелия и водорода (Макдугаллом). В первом случае согласие с опытными данными является очень хорошим как в отношении наблюдаемых значений полных сечений, так и для угловых распределений, измеренных Арно и Рамзауэром (за исключением очень низких значений энергии (меньше 3 В)).

В случае гелия мы имеем первое определенное указание на недостаточность вышеизложенной теории. Для таких легких атомов значения

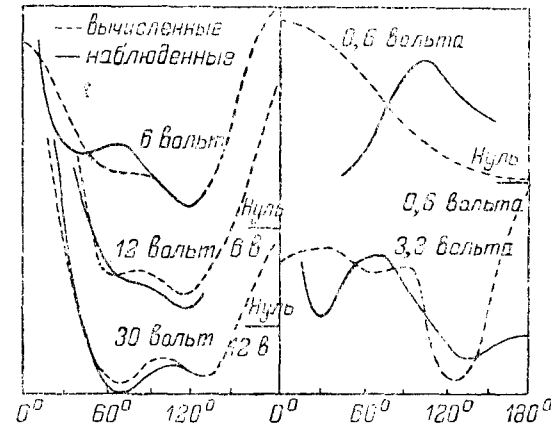


Рис. 23.

$\frac{\pi}{2}$ достигает лишь фаза нулевого порядка; при скоростях электрона, меньших 20 V, влияние членов более высокого порядка очень мало. Соответствующее угловое распределение не зависит от величины угла, однако наблюдаемые кривые имеют минимум, если скорость электрона меньше 15 V. Это показано на рис. 24. Наличие этого минимума при очень малых скоростях не может быть объяснено с помощью метода парциальных сечений; для объяснения этих особенностей наша теория нуждается в дальнейшем развитии (см. § 8). Аналогичные явления наблюдаются и в молекулярном водороде. Возможно, что в последнем случае существенную роль играет химическая связь;

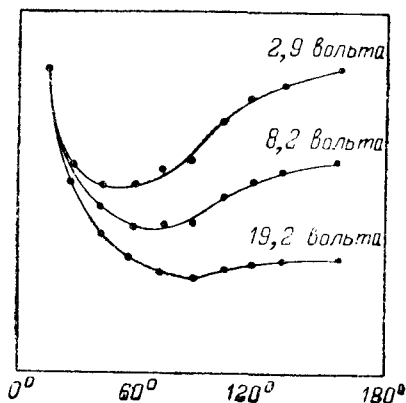


Рис. 24.

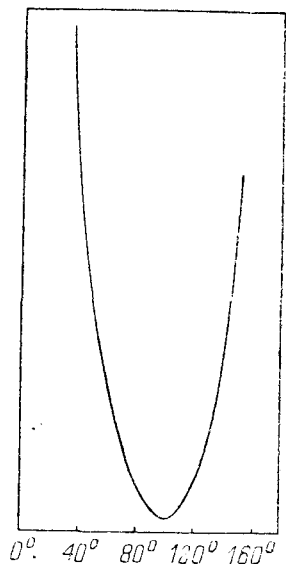


Рис. 25.

вероятнее, однако, что причина аномалии имеет тот же характер, что и в случае гелия (обмен). Этот вопрос будет рассмотрен подробнее в § 8.

При сравнении теоретических результатов с экспериментальными данными для неона и паров ртути мы можем воспользоваться приближенными методами вычисления. Для неона при энергиях, меньших 100 V, существенным является только один член ряда парциальных сечений; член этот — порядка единицы, откуда, согласно теории, интенсивность рассеяния $I(\theta)$ должна меняться как $\cos^2\theta$. Экспериментальные данные для электронов с не слишком малой энергией подтверждают это положение. Из рис. 25 следует, что угловое распределение электронов с энергией 80 V (наблюдено Мором и Николаем) имеет резкий минимум при 90° , причем кривая симметрична относительно соответствующей оси.

При меньших значениях энергии кривые отличаются, однако, от кривой $\cos^2\theta$ в двух отношениях. Во-первых, минимум уже не соответствует 90° ; это обусловлено влиянием гармонического члена нулевого порядка. Во-вторых, при энергиях, меньших 50 V, появляется точка

перегиба; при уменьшении энергии она становится более заметной. Едва ли это может быть обусловлено гармоническими членами более высокого порядка, если принять во внимание малую пространственную протяженность поля неона. Это влияние может быть, однако, обусловлено обменным эффектом (см. § 9).

Для паров ртути соответствующие вычисления были произведены Хеннебергом, а также Мессен и Мором с помощью приближенного метода, описанного в § 3.1 главы XIII; при этом большие значения фаз определялись по методу Джеффри, а малые — по методу Борна; промежуточные значения получались путем интерполяции. Вычисленные угловые распределения сравнены с наблюдениями Арно на рис. 26. Принимая во внимание приближенность этого метода, получаемое согласие можно считать весьма удовлетворительным, что свидетельствует о применимости метода Факсена и Хольтмарка к вычислению упругого рассеяния медленных электронов тяжелыми атомами. Для легких атомов, например для гелия и водорода, необходимо воспользоваться более высокими приближениями; этим вопросом мы займемся в следующем параграфе. В случае благородных газов вблизи минимального значения эффективного сечения теория становится непригодной. Причина этого обстоятельства пока еще не ясна, оно может быть, однако, обусловлено, так же как и в случае легких атомов, влиянием электронного обмена.

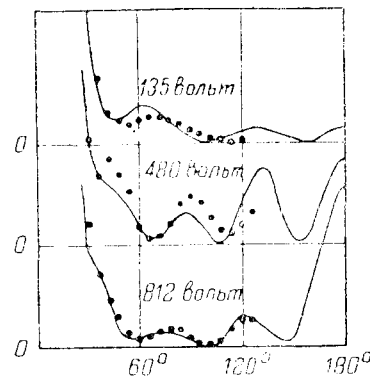


Рис. 26.

§ 7. Электронный обмен при упругих столкновениях

В § 4 главы VIII была рассмотрена возможность электронного обмена между атомом и сталкивающимся с ним пучком электронов. При этом было показано, что падающий электрон может быть либо непосредственно рассеян, либо может обменяться местом с атомным электроном. Было найдено также, что вероятности этих двух процессов не аддитивны; в силу необходимости применения антисимметричных волновых функций мы должны складывать волновые амплитуды, а не интенсивности.

Возможность обменной интерференции впервые была указана Оппенгеймером ¹⁾, пытавшимся объяснить его минимум, наблюдаемый на кривых зависимости эффективных сечений от скоростей электронов для тяжелых благородных газов при очень низких значениях энергии. В связи с рассмотренной в § 4 теорией эта точка зрения предста-

¹⁾ Oppenheimer, Phys. Rev., **32**, 361, 1928.

вляется весьма мало вероятной. Для легких атомов, например гелия и водорода, обменная интерференция должна, однако, играть весьма существенную роль при медленных столкновениях.

§ 8. Эффект электронного обмена при упругих столкновениях электронов с атомами водорода и гелия

В дальнейшем мы будем пользоваться обозначениями, принятыми нами в § 4 главы VIII. Мы показали, что упругое рассеяние электронов атомами водорода и гелия может быть описано с помощью двух волновых функций $F_0(\vec{r}_1)$ и $G_0(\vec{r}_2)$, имеющих следующий асимптотический вид

$$\left. \begin{aligned} F_0(\vec{r}_1) &\sim \exp ikz_1 + r_1^{-1} f_0(\theta_1, \varphi_1) \exp ikr_1 \\ G_0(\vec{r}_2) &\sim r_2^{-1} g_0(\theta_2, \varphi_2) \exp ikr_2. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Дифференциальное сечение для упругого столкновения равняется при этом

$$\begin{aligned} I(\theta) d\omega &= \frac{1}{4} \{ 3|f_0 + g_0|^2 + |f_0 - g_0|^2 \} d\omega \quad \text{для водорода,} \\ &= |f_0 - g_0|^2 d\omega \quad \text{для гелия.} \end{aligned}$$

Для простоты рассмотрим сперва случай водорода. В главе VIII было показано, что функции $F_0(\vec{r}_1)$ и $G_0(\vec{r}_2)$ удовлетворяют уравнениям

$$\left. \begin{aligned} [\nabla^2 + k^2] F_0(\vec{r}_1) &= -\frac{8\pi^2 m \varepsilon^2}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_0^*(\vec{r}_2) d\tau_2, \\ [\nabla^2 + k^2] G_0(\vec{r}_2) &= -\frac{8\pi^2 m \varepsilon^2}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_0^*(\vec{r}_1) d\tau_1, \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

где функция $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ — волновая функция, характеризующая состояние всей системы.

Для того чтобы иметь возможность проинтегрировать уравнения (9), мы должны подставить в их правые части какое-либо приближенное выражение функции Ψ . Мы знаем, что Ψ может быть представлена в следующем виде:

$$\Psi = \left(\sum_n + \int \right) F_n(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2).$$

Мы можем записать ее как

$$\Psi = F_0(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) + \Phi,$$

где Φ содержит все рассеянные волны.

Функция Ψ может быть также представлена в виде

$$\Psi = \left(\sum_n + \int \right) G_n(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_1),$$

как это было показано в главе VIII. азилая Φ в ряд

$$\Phi = \left(\sum_n + \int \right) G_n'(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_1),$$

мы видим, что $G_0 = G_0'$; другими словами, „обменная“ волна содержится в Φ . Если мы примем, таким образом, что функция Ψ в правой части уравнений (9) имеет вид:

$$\Psi = F_0(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) + G_0(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) + \varphi \quad (10)$$

и пренебрежем φ , мы получим достаточно хорошее приближение, соответствующее пренебрежению влиянием всех волн, длины которых отличны от длины падающей волны.

Подставляя функцию (10) в уравнения (9), мы получаем:

$$\begin{aligned} \left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00}(r_1) \right] F_0(\vec{r}_1) &= \\ = -\frac{8\pi^2 m \varepsilon^2}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) G_0(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) d\tau_2 \end{aligned} \quad (11a)$$

и

$$\begin{aligned} \left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00}(r_2) \right] G_0(\vec{r}_2) &= \\ = -\frac{8\pi^2 m \varepsilon^2}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right) F_0(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_0^*(\vec{r}_1) d\tau_1, \end{aligned} \quad (11b)$$

где

$$V_{00}(r) = -\varepsilon^2 \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) |\psi_0(\vec{r}_2)|^2 d\tau_2.$$

Перейдя в выражении для G_0 от переменной \vec{r}_2 к переменной \vec{r}_1 и далее складывая и вычитая уравнения (11a) и (11b), имеем:

$$\begin{aligned} \left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00}(r_1) \right] \{ F_0(\vec{r}_1) \pm G_0(\vec{r}_1) \} &= \\ = \mp \frac{8\pi^2 m \varepsilon^2}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \{ F_0(\vec{r}_2) \pm G_0(\vec{r}_2) \} \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) d\tau_2. \end{aligned} \quad (12)$$

Это „интегро-дифференциальное“ уравнение может быть преобразовано в интегральное уравнение. Нам интересуют то его решение относительно $F_0 \pm G_0$, которое имеет следующий асимптотический вид:

$$F_0(\vec{r}) \pm G_0(\vec{r}) \sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} \{ f(\theta, \varphi) \pm g(\theta, \varphi) \}. \quad (13)$$

Будем рассматривать правую часть уравнения (12) как некоторую известную функцию $\varphi(\vec{r}_1)$ от r_1 . Мы можем в таком случае написать:

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00}(r) \right] [F_0(\vec{r}) \pm G_0(\vec{r})] = \pm \varphi(\vec{r}). \quad (14)$$

Решение неоднородного уравнения этого типа было рассмотрено нами в § 3 главы VI. Обозначим через $\mathfrak{F}(r, \theta)$ решение однородного уравнения

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00}(r) \right] \mathfrak{F}(r, \theta) = 0, \quad (15)$$

имеющее асимптотическую форму

$$\mathfrak{F}(r, \theta) \sim e^{ikz} + (2ikr)^{-1} e^{ikr} \sum_s (2s+1) [\exp(2i\eta_s) - 1] P_s(\cos \theta), \quad (16)$$

что соответствует падающей плоской волне и расходящейся сферической волне (метод получения такого решения описан в главе II); в таком случае асимптотическая форма искомого решения уравнения (14) имеет следующий вид:

$$F_0(\vec{r}) \pm G_0(\vec{r}) \sim \mathfrak{F}(r, \theta) \pm r^{-1} e^{ikr} \frac{1}{4\pi} \int \varphi(\vec{r}') \mathfrak{F}(r', \pi - \Theta) d\tau',$$

где Θ — угол между векторами \vec{r} и \vec{r}' .

Подставляя эту функцию в уравнение (12), мы получаем:

$$\begin{aligned} F_0(\vec{r}) \pm G_0(\vec{r}) &\sim e^{ikz} + (2ikr)^{-1} e^{ikr} \sum_s (2s+1) [\exp(2i\eta_s) - 1] P_s(\cos \theta) \pm \\ &\pm \frac{e^{ikr}}{r} \frac{2\pi m e^2}{h^2} \int \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \{ F_0(\vec{r}_2) \pm \\ &\pm G_0(\vec{r}_2) \} \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) \mathfrak{F}_0(r_1, \pi - \Theta) d\tau_1 d\tau_2, \end{aligned} \quad (17)$$

где Θ — угол между \vec{r} и r_1 . Интересно охарактеризовать физический смысл различных членов этого выражения. Первый член описывает падающую плоскую волну, второй — волну, рассеянную статическим полем атома $V_{00}(r)$, третий — рассеянную волну, обусловленную электронным обменом. Вычисление амплитуды рассеянной волны первого типа было рассмотрено нами в предыдущем параграфе и мы не будем здесь на нем останавливаться.

Для вычисления обменного эффекта мы должны теперь перейти к дальнейшим приближениям. Это может быть осуществлено без затруднений в двух следующих случаях:

1) влияние атомного поля мало, так что падающую волну приближенно можно рассматривать как плоскую. В этом случае в правой части выражения (17) полагаем

$$\begin{aligned} F_0(\vec{r}) - G_0(\vec{r}) &= \exp^*(ik\vec{n}_0 \cdot \vec{r}) \\ \mathfrak{F}(r_1, \pi - \Theta) &= \exp(-ik\vec{n} \cdot \vec{r}_1), \end{aligned}$$

где \vec{n}_0 и \vec{n} — единичные векторы в направлении падающих и рассеянных волн. Мы получаем при этом для обменной амплитуды:

$$g(\theta) = \frac{2\pi m e^2}{h^2} \int \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \exp\{ik(\vec{n}_0 \cdot \vec{r}_2 - \vec{n} \cdot \vec{r}_1)\} \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2. \quad (18)$$

2) Эффект обмена мал по сравнению с непосредственным рассеянием. В этом случае мы можем положить в правой части уравнения (17)

$$F_0(\vec{r}_2) - G_0(\vec{r}_2) = \mathfrak{F}_0(r_2, \theta_2)$$

и обменная амплитуда оказывается равной

$$g(\theta) = \frac{2\pi m e^2}{h^2} \int \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \mathfrak{F}_0(r_2, \theta_2) \mathfrak{F}_0(r_1, \pi - \Theta) \psi_0^*(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) d\tau_1 d\tau_2. \quad (19)$$

Аналогичные формулы могут быть получены и для случая гелия. Так как при этом нас интересует лишь антисимметричное сечение, мы можем воспользоваться третьим приближением. Влияние электронного обмена заключается в том, что амплитуда рассеянной волны уменьшается таким образом, что в некоторой области, где $f(\theta)$ и $g(\theta)$ одинакового порядка величины, равенность $F_0 - G_0$ в правой части выражения (17) может быть заменена плоской волной; мы получаем при этом

$$\begin{aligned} g(\theta) &= \frac{2\pi m e^2}{h^2} \int \int \int \left(\frac{2}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} \right) \exp(ik\vec{n}_0 \cdot \vec{r}_2) \times \\ &\times \mathfrak{F}_0(r_1, \pi - \Theta) \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_3) \psi_0^*(\vec{r}_2, \vec{r}_3) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3. \end{aligned} \quad (20)$$

Мы не имеем, однако, достаточных оснований поступать подобным образом, так как хотя на бесконечности амплитуда рассеянной волны мала, отклонения $F_0 - G_0$ от плоской волны внутри атома могут быть весьма значительными.

При рассмотрении молекулярного водорода мы предполагали, что влияние молекулярной связи мало и что рассеяние достаточно точно может быть охарактеризовано членами f_0 и g_0 , соответствующими атому, если мы примем во внимание соотношения симметрии для системы с двумя электронами.

Прежде чем применять приведенные в этом параграфе формулы, мы остановимся подробнее на содержащихся в них приближениях.

Возвращаясь к § 4.1 главы VIII, мы видим, что волновая функция Ψ должна удовлетворять соотношениям ортогональности

$$\left. \begin{aligned} \int \{ \Psi - F_0(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \} \psi_0^*(\vec{r}_2) d\tau_2 &= 0, \\ \int \{ \Psi - G_0(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) \} \psi_0^*(\vec{r}_1) d\tau_1 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Приближенные значения Ψ не будут удовлетворять этим условиям в выражениях для амплитуд рассеяния появятся, следовательно, члены, которые в случае точной формулы обращались бы в нуль. Так, например, в выражениях (18), (19) и (20) должны были бы обращаться в нуль члены порядка $\frac{1}{r_1}$. При достаточно больших скоростях столкновения эти члены малы, однако при малых скоростях связанные с ними ошибки будут весьма значительными. Мы не можем, однако, просто отбросить члены порядка $\frac{1}{r_1}$ в интегралах, определяющих амплитуды, так как роль остальных членов в точной теории также будет иметь иной характер. За отсутствием более точного метода вычислений мы будем сохранять члены порядка $\frac{1}{r_1}$ как частично компенсирующие неточность остальных членов. Финберг¹⁾ воспользовался иным более точным методом вычисления поправки на неортогональность. Вместо того чтобы подставлять в формулу (17) выражение

$$F_0(\vec{r}_2) - G_0(\vec{r}_2) = \mathfrak{F}_0(\vec{r}_2),$$

он пользуется функцией

$$\mathfrak{F}_0(\vec{r}_2) = \psi_0(\vec{r}_2) \int \mathfrak{F}_0(\vec{r}) \psi_0^*(\vec{r}) d\tau,$$

ортогональной к $\psi_0(\vec{r}_2)$. Подставляя ее в уравнение (17), мы получаем уравнения типа (18) и (19), в которых $\frac{1}{r_1}$ заменено однако интегралом:

$$\int \frac{1}{r_{12}} |\psi_0(\vec{r}_2)|^2 d\tau_2.$$

Этот метод отчасти оправдывается тем обстоятельством, что если $F_0(\vec{r}_1) \pm G_0(\vec{r}_1)$ — решение уравнения (12), то

$$F_0(\vec{r}_1) \pm G_0(\vec{r}_1) + c\psi_0(\vec{r}_1)$$

также является его решением.

Приближение, при котором мы пренебрегаем влиянием неупругого рассеяния волн, связано с вышеописанными трудностями; при малых скоростях мы встречаемся, однако, с другими затруднениями. До сих пор не существует удовлетворительной теории, с помощью которой можно было бы учесть влияние неупругого рассеяния волн; более точный метод должен быть, вероятно, сходен с изложенным в § 3.3 главы VII методом возмущенных волновых функций.

1) Feenberg, Phys. Rev., 40, 40, 1932, и 42, 17, 1932; см. также Morse, Rev. of Mod. Phys. 4, 577, 1932.

§ 9. Пределы применимости приближений.

В связи со значительной трудностью получения точных решений задач, связанных с обменным эффектом, весьма существенно установить пределы применимости приближенных методов, пригодных для решения этих задач.

Асимптотическая форма решения уравнения (12) была нами представлена в следующем виде:

$$F_0(\vec{r}) \pm G_0(\vec{r}) \sim e^{ikz} + e^{ikr} (2ikr)^{-1} \sum_s (2s+1) [\exp(2i\eta_s) - 1] P_s(\cos \theta) \pm e^{ikr} r^{-1} \frac{2\pi m \varepsilon^2}{h^2} \int \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) [F_0(\vec{r}_2) \pm G_0(\vec{r}_2)] \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) F_0(r_1, \pi - \Theta) d\tau_1 d\tau_2, \quad (22)$$

где η_s — сдвиг фазы, обусловленный непосредственным рассеянием одним лишь „статическим“ полем V_{00} . Асимптотическая форма этого решения может быть также представлена в виде:

$$e^{ikz} + (2ikr)^{-1} e^{ikr} \sum_s (2s+1) [\exp(2i\sigma_s) - 1] P_s(\cos \theta). \quad (23)$$

Разность $\sigma_s - \eta_s$ можно, таким образом, рассматривать как сдвиг фаз, обусловленный обменным эффектом. Если эта разность мала, выражение (23) приобретает вид:

$$e^{ikz} + (2ikr)^{-1} e^{ikr} \sum_s (2s+1) [\exp(2i\eta_s) - 1] P_s(\cos \theta) + (kr)^{-1} e^{ikr} \sum_s (2s+1) e^{2i\eta_s} (\sigma_s - \eta_s) P_s(\cos \theta). \quad (24)$$

Третий член этого выражения соответствует, таким образом, третьему члену выражения (22). Приближенный метод (см. формулу (2)), применяя который мы полагали $F_0(r_2, \theta_2) = F_0(\vec{r}_2) \pm G_0(\vec{r}_2)$, дает для этого члена:

$$r^{-1} e^{ikr} \frac{2\pi m \varepsilon^2}{h^2} \int \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) F_0(r_2, \theta_2) F_0(r_1, \pi - \Theta) \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 = \\ = r^{-1} e^{ikr} \frac{32\pi^3 m \varepsilon^2}{h^2} \sum_s e^{2i\eta_s} P_s(\cos \theta) \int \int \gamma_s(r_1, r_2) \times \\ \times F_0^s(\vec{r}_1) F_0^s(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) \cdot r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2, \quad (25)$$

где

$$F_0(r_2, \theta_2) = \sum_s e^{i\eta_s} (2s+1) F_0^s(r_2) P_s(\cos \theta_2)$$

и

$$\gamma_s = -r_1^s r_2^{-s-1}, \quad r_1 > r_2 \quad (s \neq 0) \quad \gamma_0 = 0, \quad r_1 > r_2 \\ = -r_2^s r_1^{-s-1}, \quad r_1 < r_2 \quad \gamma_0 = r_1^{-1} - r_2^{-1}, \quad r_1 < r_2$$

Мы должны, таким образом, связать $\sigma_s - \eta_s$ с

$$\frac{32\pi^3 m \varepsilon^2 R}{h^2} \int \int \gamma_s F_0^s(\vec{r}_1) F_0^s(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) \psi_0^*(\vec{r}_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2, \quad (26)$$

в условие применимости этого приближения, по аналогии с условием применимости приближения Борна (см. § 2 главы VII), сводится к малости выражения (26) по сравнению с единицей для всех s , т. е. к условию $\sigma_s - \eta_s \gg 1$ для всех s .

Хотя вышеизложенные соображения вряд ли могут быть названы строгим доказательством (так как мы предположили без доказательства, что $\sigma_s - \eta_s$ эквивалентно выражению (26), когда обе они малы), можно, однако, ожидать, что найденный нами критерий характеризует до некоторой степени точность применяемых приближений.

§ 10. Результаты вычислений и сравнение с опытными данными

Вычисление обменных амплитуд для водорода и гелия впервые было произведено Мессе и Мором¹⁾ с помощью формул (18), (19) и (20); для более подробного ознакомления с этими вычислениями

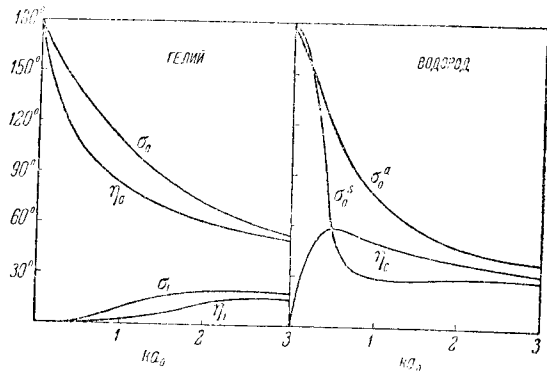


Рис. 27.

Мы отсылаем читателя к оригинальным статьям. Несколько позднее Морз и Эллис²⁾ с помощью дифференциального анализатора Буша³⁾ нашли численные решения уравнения (12) для этих же атомов. При этом они воспользовались также методом Финберга, заменив $\frac{1}{r_1}$ инте-

гралом $\int \frac{1}{r_{12}} \psi_0(\vec{r}_2) d\tau_2$; полученные ими результаты приведены на рис. 27. На этих кривых фазы η_s , полученные без учета обменного эффекта, сравнены с фазами σ_s , полученными при рассмотрении обменного эффекта. Для случая гелия мы имеем дело только с антисимметричным решением, однако для водорода имеются две группы фаз — σ_s^A и σ_s^S соответствующие обоим типам симметрии. Приближенный

¹⁾ Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A, **132**, 605, 1931, **136**, 289, 1931 и **139**, 187, 1932.

²⁾ Massey and Allis, Phys. Rev. **44**, 269, 1933.

³⁾ Bush and J. Frank, Inst. **212**, 447, 1931.

метод, примененный Мессе и Мором, в случае гелия справедлив по всей вероятности вплоть до энергии электронов в 10 вольт, но является несколько менее точным для водорода и совсем неприменим для последнего при малых значениях энергии электронов.

Приведенные кривые свидетельствуют о том, что сдвиги фаз, обусловленные обменным эффектом, чрезвычайно малы для электронов, энергия которых превышает 70 вольт. Для рассмотрения обменного эффекта при малых значениях скоростей удобнее всего представить обменную амплитуду в следующем виде:

$$g(\theta) = \sum_s (e_{rs} + ic_{is}) P_s(\cos \theta); \quad (27)$$

сходимость этих рядов аналогична сходимости рядов, характеризующих прямое рассеяние:

$$f(\theta) = \sum_s (d_{rs} + id_{is}) P_s(\cos \theta). \quad (28)$$

Амплитуда рассеяния имеет в этом случае вид:

$$f(\theta) - g(\theta) = \sum_s \{ (d_{rs} - e_{rs}) + i(d_{is} - e_{is}) \} P_s(\cos \theta). \quad (29)$$

В § 6 было указано, что при малых скоростях столкновения существенными являются только члены d_{r0} и d_{i0} , входящие в функцию $f(\theta)$; результирующее рассеяние не будет, таким образом, зависеть от угла при значениях энергии ниже 15 вольт для гелия и 20 вольт для водорода. Это обстоятельство противоречит опытным данным; эта трудность может быть, однако, устранена, если мы введем в рассмотрение обменный эффект. При больших скоростях столкновений (превышающих 100 вольт) членами e_{rs} и e_{is} можно пренебречь; по мере убывания скорости амплитуды e_{r0} и e_{i0} быстро возрастают и так как знак у такой же, как знак d_{r0} и d_{i0} , это приводит к уменьшению члена нулевого порядка в выражении (29). Первый гармонический член приобретает, таким образом, существенное значение, и угловое распределение становится неравномерным (как это и наблюдается экспериментально). Мессе и Мор показали, что заметные отклонения от равномерного распределения должны иметь место при энергиях электронов, лежащих ниже 20 электрон-вольт для гелия и 15 электрон-вольт для водорода; эти данные находятся в согласии с точными вычислениями Морзе и Эллиса. Сравнение

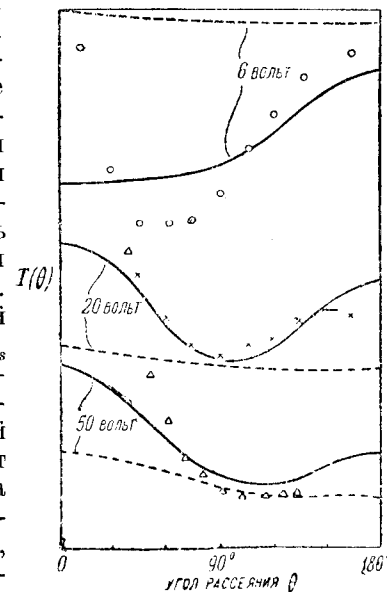


Рис. 28.

наблюденного и вычисленного значений угловых распределений для гелия приведено на рис. 28. Введение в рассмотрение обменного эффекта значительно улучшает, таким образом, согласие теоретических результатов с опытными данными, хотя при малых значениях углов расхождение между ними остается заметным. Теория приводит к слишком малым значениям величин, характеризующих рассеяние в ближайшем параграфе будет дано общее объяснение этого обстоятельства в терминах поляризации атома сталкивающимися с ним электроном.

Вполне удовлетворительное согласие имеет место также для вычисленного и наблюдаемого значений полных эффективных сечений, однако не вполне еще ясно, почему электронный обмен оказывается не существенным при рассмотрении рассеяния электронов тяжелыми атомами.

§ 11. Поляризационный эффект.

До сих пор мы пренебрегали рассмотрением влияния неупруго рассеянных волн на упругое рассеяние. Покажем, что учет этого влияния при малых углах рассеяния приводит к более быстрому изменению рассеяния с изменением угла; этим обстоятельством можно, по всей вероятности, объяснить расхождение между теорией и опытом, имеющее место для гелия (см. § 3.1 главы IX).

Для простоты рассмотрим вопрос о рассеянии электронов водородо-подобными атомами. Возвращаясь к § 1 главы VIII, мы видим, что

функция $F_0(\vec{r}_1)$, описывающая упругое рассеяние, удовлетворяет уравнению:

$$(\nabla^2 + k^2) F_0(\vec{r}_1) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} \sum_n V_{n0}(\vec{r}_1) F_n(\vec{r}_1), \quad (30)$$

где

$$V_{0n} = e^2 \int \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1} \right) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_2.$$

Мы показали также, что с точностью первого приближения теории Борна:

$$\left. \begin{aligned} F_n &= -\frac{2\pi m}{h^2} \int \frac{\exp\{ik_n |\vec{r}_1 - \vec{r}_3|\}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} \exp(ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_3) V_{0n}(\vec{r}_3) d\tau_3, \\ F_0 &= e^{ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1} - \frac{2\pi m}{h^2} \int \frac{\exp\{ik |\vec{r}_1 - \vec{r}_3|\}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} \exp(ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_3) V_{00}(\vec{r}_3) d\tau_3. \end{aligned} \right\} (31)$$

Предположим теперь, что скорость падающих электронов столь велика, что для всех волн, амплитуда $F_n(\vec{r}_1)$ которых заметно отлична от

нуля, имеет место соотношение $k_n \approx k$. В таком случае уравнение (30) может быть приведено к следующему виду:

$$(\nabla^2 + k^2) F_0(\vec{r}_1) = \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00} e^{ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1} - \frac{16\pi^3 m^2}{h^4} \int \frac{\exp\{ik |\vec{r}_1 - \vec{r}_3|\}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} \exp(ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_3) \sum_n V_{n0}(\vec{r}_1) V_{0n}(\vec{r}_3) d\tau_3. \quad (32)$$

Вспользуемся теперь соотношением:

$$\sum_n V_{n0}(\vec{r}_1) V_{0n}(\vec{r}_3) = \int V(\vec{r}_2, \vec{r}_3) V(\vec{r}_2, \vec{r}_1) |\psi_0(\vec{r}_2)|^2 d\tau_2,$$

где

$$V(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = e^2 \left(\frac{1}{r_{23}} - \frac{1}{r_3} \right).$$

Это дает:

$$\begin{aligned} [\nabla^2 + k^2] F_0 &= \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00}(\vec{r}_1) e^{ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1} - \\ &= \frac{16\pi^3 m^2}{h^4} \int \int \frac{\exp\{ik |\vec{r}_1 - \vec{r}_3|\}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} \exp(ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_3) \times \\ &\quad \times V(\vec{r}_2, \vec{r}_3) V(\vec{r}_2, \vec{r}_1) |\psi_0(\vec{r}_2)|^2 d\tau_2 d\tau_3. \end{aligned} \quad (33)$$

Для вычисления интеграла, стоящего в правой части этого уравнения, перенесем теперь начало координат в точку \vec{r}_1 и обозначим сферические координаты по отношению к точке \vec{r}_1 через ρ , ϑ и ψ таким образом, что если где ρ_0 , ϑ_0 , ψ_0 — координаты прежнего начала координат, то

$$\rho_0 = r_1, \quad \vartheta_0 = \pi - \vartheta_1, \quad \psi_0 = \varphi_1.$$

В результате:

$$(\nabla^2 + k^2) F_0 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} e^{ik \vec{n}_0 \cdot \vec{r}_1} \{V_{00}(\vec{r}_1) + v_{00}(\vec{r}_1)\},$$

где

$$\begin{aligned} v_{00}(\vec{r}_1) &= -\frac{2\pi m}{h^2} \int \int \exp\{ik(\rho_3 + \vec{n}_0 \cdot \rho_3)\} V(\rho_2 - \vec{r}_1, \vec{r}_1) \times \\ &\quad \times V(\rho_2 - \vec{r}_1, \rho_3 - \vec{r}_1) |\psi_0(\rho_2 - \vec{r}_1)|^2 \rho_3^{-1} d\rho_3 d\rho_2. \end{aligned} \quad (34)$$

Неупруго рассеянные волны учитываются, таким образом, путем введения в рассмотрение дополнительного эффективного потенциала рассеяния v_{00} . Последний связан, однако, также и с взаимодействием

F_0 с самим собой; это взаимодействие уже рассматривалось нами методом Факсена и Хольстмарка путем точного решения уравнения

$$(\nabla^2 + k^2) F_0 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00} F_0.$$

Для получения „истинного“ дополнительного потенциала, обусловленного одним лишь взаимодействием с неупруго рассеянными волнами, из v_{00} должен быть вычтен член:

$$u_{00} = -\frac{2\pi m}{h^2} V_{00}(r_1) \int V_{00}(|\rho_3 - r_1|) \exp\{ik(\rho_3 + n_0 \cdot \rho_3)\} \rho_3^{-1} d\rho_3. \quad (35)$$

Потенциал $v_p = v_{00} - u_{00}$ может быть назван поляризационным потенциалом и может быть рассматриваем, как обусловленный взаимодействием различных рассеянных волн друг с другом или же как изменение атомного поля, обусловленное взаимодействием с падающим электроном.

Вычисление v_p представляет собой весьма длительную процедуру и может быть осуществлено только путем разложения различных входящих в его состав функций по сферическим функциям. Для больших v_p , r_1 имеет следующий асимптотический вид¹⁾:

$$v_p(r_1) \sim -\frac{e^2}{a_0} \frac{2}{\mu^{3/2}} \left[\frac{2i}{r_1^3} + \frac{1 - 3 \cos \theta_1}{r_1^{4/2}} \left\{ 1 - \frac{\mu^6 e^{2kr_1}}{(\mu^2 + 4k^2)^3} \right\} + O\left(\frac{1}{r_1^5}\right) \right], \quad (36)$$

где $\mu = \frac{Z}{a_0}$, а Z — эффективный заряд ядра. Ясно без дальнейших вычислений, что влияние „истинного“ поляризационного потенциала сводится к увеличению малого угла рассеяния благодаря наличию члена (чисто мнимого), который при больших r_1 убывает как r_1^{-3} . В действительности интенсивность рассеяния на единицу телесного угла, обусловленного этим потенциалом, при $\theta = 0$ становится логарифмически бесконечной, хотя рассеяние на единицу угла продолжает стремиться к нулю по мере уменьшения угла рассеяния. Вещественная часть второго члена в асимптотическом разложении v_p соответствует классическому поляризационному эффекту; однако поляризуемость атома уменьшается с возрастанием скорости падающего электрона, как это и следовало ожидать (так как электрон проходит через атом слишком быстро для того, чтобы распределение атомного заряда могло испытать воздействие возмущения).

¹⁾ Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A. 146, 880, 1934.

Мы видим, таким образом, что с помощью поляризационного эффекта можно было бы объяснить избыточное рассеяние, наблюдающееся в гелии при малых значениях углов; интересно поэтому провести более подробное сравнение между экспериментальными кривыми, и кривыми, вычисленными при учете поляризации. К счастью, сходимость рядов сферических функций, найденных для разложения $v_{00} - u_{00}$, является достаточно быстрой для того, чтобы эффект этот был заметным. Эта сходимость подтверждается также тем обстоятельством, что малый угол рассеяния в значительной степени определяется первым членом выражения (36), соответствующим члену нулевого порядка в разложении на сферические функции.

При вычислении рассеяния, обусловленного потенциалом v_p с помощью формулы Борна (см. § 1 главы VII), помимо численного множителя, для водорода и гелия, близкого к единице, отношение амплитуды поляризации к величине ее, определяемой в первом приближении Борна, является функцией $\frac{\mu}{k}$.

Так как отношение значений μ для гелия и водорода равно 1,69, этот эффект приблизительно одинаков для электронов с энергией 2,85 электрон-вольт в гелии и для электронов с энергией 1 вольт в водороде. Это обстоятельство находится в согласии с опытными данными. На рис. 29 приведены угловые распределения, вычисленные при учете поляризации, а также опытные кривые. Для удобства сравнения выбран масштаб, при котором наблюдаемые и вычисленные величины для электронов с энергией 350 электрон-вольт совпадают при 60° . Согласие между теоретическими и опытными данными является весьма удовлетворительным и почти не оставляет сомнений в справедливости вышеизложенной теории. Дальнейшее подтверждение теории дают опыты Уайддингтона¹⁾, произведенные при малых углах рассеяния в гелии. Его наблюдения, относящиеся к значительно меньшим углам ($2^\circ - 5^\circ$), показывают, что быстрое возрастание интенсивности рассеяния по мере убывания угла рассеяния продолжается вплоть до весьма малых значений углов.

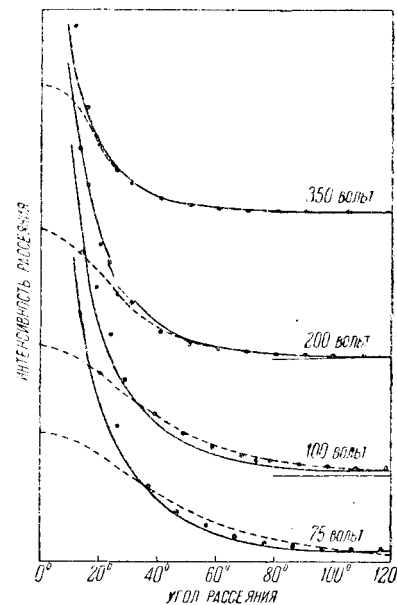


Рис. 29.

¹⁾ Whiddington, Nature, 133, 685, 1934.

Г Л А В А XI.

НЕУПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ ЭЛЕКТРОДОВ С АТОМАМИ.

В этой главе мы ограничимся рассмотрением быстрых электронов ($v \gg e^2/h$); в этом случае первое приближение теории Борна оказывается справедливым, что вносит значительные упрощения и дает нам возможность с достаточной степенью точности вычислить задерживающую способность любого вещества, вероятность ионизации внутренних уровней атома и т. д. и сравнить получаемые при этом величины с экспериментальными данными. В первую очередь мы займемся подробным рассмотрением неупругих столкновений электронов с атомами водорода и гелия и обобщим затем результаты, получаемые для этих простых случаев, на случай более сложных атомов.

§ 1. Общие формулы.

Рассмотрим столкновение электрона с атомом, в результате которого атом переходит из m -ого состояния в n -ое. Если E_m и E_n — энергии этих атомных состояний, а v и v_{mn} — начальная и конечная скорости сталкивающегося электрона, то

$$\frac{1}{2} m (v^2 - v_{mn}^2) = E_n - E_m. \quad (1)$$

В главе VIII было показано, что в пределах применимости первого приближения теории Борна дифференциальное сечение, соответствующее столкновению, определяется выражением:

$$I_{mn}(\theta) d\omega = \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \frac{k_{mn}}{k} \left| \int \int V(\vec{r}, \vec{R}) \exp \{ i(k_{mn} \vec{n}_1 - k n_0) \cdot \vec{R} \} \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{R} \right|^2 d\omega, \quad (2)$$

где $\frac{kh n_0}{2\pi}$ и $\frac{k_{mn} h n_1}{2\pi}$ — начальные и конечные значения вектора импульса сталкивающегося электрона, а ψ_m и ψ_n — волновые функции, характеризующие начальное и конечное состояния атома. Энергия взаимодействия V — кулоново взаимодействие между падающим и атомным электронами ($e^2/|\vec{r} - \vec{R}|$)¹⁾.

1) Кулоново взаимодействие падающего электрона и атомного ядра отпадает в виду ортогональности атомных волновых функций.

Заметим, что вероятность перехода из одного состояния в другое, принадлежащее к иной системе термов (например, сигулетно-триплетного перехода для гелия) в этом приближении равна нулю, так как возмущающий потенциал V симметричен по отношению к координатам атомных электронов, тогда как волновые функции ψ_n, ψ_m будут обладать различными свойствами симметрии. Входящий в выражение (2) интеграл будет поэтому обращаться в нуль. Этот результат находится в согласии с экспериментальными данными о быстрых столкновениях; он не оправдывается, однако, для медленных столкновений. Это расхождение обусловлено пренебрежением электронным обменом, как это будет показано в § 5 этой главы.

Если сталкивающийся электрон ионизует атом, то состояние n будет принадлежать к непрерывному спектру. Уровни непрерывного спектра мы будем характеризовать величинами x , связанными с энергиями уровней соотношением:

$$E_x = x^2 h^2 / 8\pi^2 m. \quad (3)$$

Вопрос о нормировке волновых функций непрерывного спектра рассматривается в § 2.3 главы XIV. Мы нормируем их таким образом, чтобы дифференциальное сечение (2), будучи умноженным на dx , соответствовало интервалу энергии, для которого x лежит в интервале между x и $x + dx$; мы получаем в результате

$$\int_0^\infty \psi_x^*(\vec{r}) \psi_{x'}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(x - x'). \quad (4)$$

Дифференциальное сечение, соответствующее возбуждению группы непрерывных энергетических уровней, лежащих в интервале между x и $x + dx$, определяется выражением:

$$I_{mx}(\theta) dx = \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \frac{k_{mx}}{k} \left| \int \int V \exp \{ i(k_{mx} \vec{n}_1 - k n_0) \cdot \vec{R} \} \psi_x^* \psi_m d\vec{r} d\vec{R} \right|^2 dx. \quad (5)$$

§ 1. 1. Введение импульсов в качестве переменных. Во многих случаях оказывается удобным перейти от угловых переменных к импульсам. Вектор

$$(k_{mn} \vec{n}_1 - k n_0) h / 2\pi$$

определяет изменение импульса падающего электрона. Если мы выберем этот вектор в качестве оси полярных координат, то¹⁾

$$\exp \{ i(k_{mn} \vec{n}_1 - k n_0) \cdot \vec{R} \} = \exp(iKX), \quad (6)$$

где

$$K = |k_{mn} \vec{n}_1 - k n_0| = (k_{mn}^2 + k^2 - 2k k_{mn} \cos \theta)^{1/2}. \quad (7)$$

1) Ср. с § 1 гл. VII. Мы пишем X вместо Z , чтобы не смешивать координату с эффективным зарядом ядра Z .

Скаляр K представляет собою численное значение изменения импульса при рассеянии электрона на угол θ . Принимая во внимание соотношение

$$K dK = k k_{mn} \sin \theta d\theta,$$

для эффективного сечения, соответствующего изменению импульса в интервале от K до $K + dK$, мы получаем выражение

$$I_{mn}(K) dK = \frac{8\pi^3 m^2}{h^4} \frac{dK}{K k^2} \left| \int \int V e^{iKX} \psi_m \psi_n^* d\mathbf{r} d\mathbf{R} \right|^2. \quad (8)$$

Это выражение может быть упрощено в результате выполнения интегрирования по координатам сталкивающегося электрона. Z атомных электронов мы будем характеризовать индексами 1, 2... Z . В таком случае

$$\int V e^{iKX} d\mathbf{R} = \varepsilon^2 \sum_{s=1}^{s=Z} \int \frac{e^{iKX}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_s|} d\mathbf{R}.$$

Воспользовавшись формулой 1)

$$\int \frac{\exp(i\mathbf{K}\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{4\pi}{K^2} e^{i\mathbf{K}\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}},$$

мы получаем

$$\int V e^{iKX} d\mathbf{R} = \frac{4\pi\varepsilon^2}{K^2} \sum_{s=1}^{s=Z} e^{iKx_s}. \quad (9)$$

Подставив это выражение в соотношение (8), получаем окончательно

$$I_{mn}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 \varepsilon^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} |\varepsilon_{mn}(K)|^2, \quad (10)$$

где

$$\varepsilon_{mn}(K) = \sum_{s=1}^{s=Z} \int e^{iKx_s} \psi_m \psi_n^* d\mathbf{r}. \quad (11)$$

Эффективное сечение, соответствующее переходу $m \rightarrow n$, мы получим, проинтегрировав выражение (10) и взяв при этом в качестве пределов интегрирования допустимые предельные значения импульса

$$Q_{mn}(k) = \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} I_{mn}(K) dK. \quad (12)$$

В следующих параграфах мы рассмотрим подробнее значения этих пределов для частного случая быстрых электронов. Легко показать, что

$$\begin{aligned} K_{\max} &= k + k_{mn}, \\ K_{\min} &= k - k_{mn} \end{aligned}$$

1) Bethe, Ann. d. Phys., 5, 325, 1930.

и что, в силу соотношения (1):

$$k^2 = k_{mn}^2 + 8\pi^2 m (E_n - E_m) / h^2.$$

В случае быстрых столкновений мы имеем

$$k_{mn} \approx k - 4\pi^2 m (E_n - E_m) / h^2 k^2$$

и следовательно

$$\left. \begin{aligned} k + k_{mn} &\approx 2k, \\ k - k_{mn} &\approx 4\pi^2 m (E_n - E_m) / h^2 k. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

§ 2. Вычисление дифференциальных сечений для водорода и гелия. Угловое распределение неупруго рассеянных электронов.

§ 2. 1. Возбуждение дискретных уровней. Для вычисления дифференциального сечения $I_{mn}(K) dK$ необходимо знать волновые функции, характеризующие состояния m и n . Мы будем предполагать в дальнейшем, что начальный уровень соответствует нормальному состоянию и будем характеризовать его индексом 0. Волновые функции нормальных состояний 1):

$$\left. \begin{aligned} \psi_0 &= (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-r_1/a_0} \text{ для водорода} \\ &= Z^3 (\pi a_0^3)^{-1} e^{-Z(r_1+r_2)/a_0} \text{ для гелия, причем } Z=1,69. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Для возбужденных состояний водородоподобных атомов волновые функции ψ_{nlm} имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{nlm} &= N_{nlm} r_1^l L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r_1 Z}{na_0} \right) \exp \left(-\frac{Zr_1}{na_0} \right) P_l^m(\cos \theta_1) e^{\pm im\varphi_1}, \\ N_{nlm}^2 &= \frac{2^{2l}}{n\pi} (2l+1) \frac{(l-m)!(n-l-1)!}{(l+m)!((n+l)!)^3} \left(\frac{Z}{na_0} \right)^{2l+3}, \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

где Z — заряд ядра; для гелия оказывается необходимым воспользоваться некоторыми приближениями. Экарт 2) показал, что хорошее приближение к волновой функции возбужденного состояния гелия (отличного от S состояния) получается с помощью симметричной комбинации произведения двух волновых функций, одна из которых описывает нормальное состояние электрона в поле ядра с зарядом равным двум, а другая — возбужденное состояние электрона в поле заряда равного единице 3). Записывая волновую функцию отдельного электрона в nlm -ом состоянии в поле заряда $Z\varepsilon$, в виде

$$\psi_{nlm}(Z|\mathbf{r})_{\varepsilon Z}$$

в качестве достаточно хорошего приближения для волновой функции

1) См. § 3 главы IX.

2) Eckart, Phys. Rev., 36, 878, 1930.

3) Для S -состояний следует применять более сложную волновую функцию. См. Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A., 140, 613, 1933.

возбужденного синглетного состояния гелия мы можем воспользоваться выражением:

$$2^{-\frac{1}{2}} \{ \psi_0(2|r_1) \psi_{nlm}(1|r_2) + \psi_0(2|r_2) \psi_{nlm}(1|r_1) \}, \quad (16)$$

где индексы 1 и 2 относятся к двум электронам.

Подставив волновые функции (16), (15) и (14) в выражение (10), определяющее дифференциальное сечение, мы видим, что

$$\varepsilon_{nlm}(K) = \alpha \int \psi_0(Z|r') \psi_{nlm}^*(Z'|r') e^{iKx'} d\tau',$$

где

$$\alpha = 1, \quad Z = Z' = 1 \quad \text{для водорода}$$

$$\alpha = 2^{\frac{1}{2}}, \quad Z = 1,69; \quad Z' = 1 \quad \text{для гелия.}$$

Этот интеграл может быть вычислен ¹⁾ для всех значений nlm ; мы получаем при этом

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nlm}(K) = & 2^{2l+3} n^{l+1} (2l+1)^{\frac{1}{2}} Z^{\frac{3}{2}} (l+1)! \{(n-l-1)!\}^{\frac{1}{2}} \{(n+l)!\}^{-\frac{1}{2}} K^l \times \\ & \times \frac{\{(nZ-1)^2 + 4\zeta^2\}^{\frac{1}{2}(n-l-3)}}{\{(nZ+1)^2 + 4\zeta^2\}^{\frac{1}{2}(n+l+3)}} [(nZ+1) \{(nZ-1)^2 + 4\zeta^2\} C_{n-l-1}^{l+2}(x) - \\ & - 2nZ \{(nZ-1)^2 + 4\zeta^2\}^{\frac{1}{2}} \{(nZ+1)^2 + 4\zeta^2\}^{\frac{1}{2}} C_{n-l-2}^{l+2}(x) + \\ & + (nZ-1) \{(nZ+1)^2 + 4\zeta^2\} C_{n-l-3}^{l+2}(x)], \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} x &= (n^2 Z^2 - 1 + 4\zeta^2)^{-\frac{1}{2}} \{ \{(nZ+1)^2 + 4\zeta^2\} \{(nZ-1)^2 + 4\zeta^2\} \}^{-\frac{1}{2}}, \\ \zeta &= \frac{1}{2} K n a_0. \end{aligned} \quad (18)$$

Коэффициенты C_s^ν определяются как коэффициенты разложения:

$$(1 - 2ut + u^2)^{-\nu} = \sum_{s=0}^{\infty} C_s^\nu(t) u^s.$$

Значения этих коэффициентов при $s=0, 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} C_0^\nu(x) &= 1, \quad C_1^\nu(x) = 2\nu x, \quad C_2^\nu(x) = \nu \{ (2\nu+1)x^2 - 1 \}, \\ C_3^\nu(x) &= 2\nu(\nu+1) \left\{ \frac{2}{3}(\nu+2)x^3 - x \right\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Для выяснения общих свойств этих формул мы ограничимся рассмотрением второго и третьего квантовых уровней. На рис. 30 приведено угло-

вое распределение электронов с начальной энергией в 200 электрон-вольт, рассеянных в результате возбуждения различных квантовых уровней атомов гелия. С целью сравнения приведены также данные о распределении, соответствующем случаю упругого рассеяния. Из чертежа ясно, что:

а) возбуждение уровней, на которые оптический переход разрешен, осуществляется с большей вероятностью, нежели возбуждение уровней, оптически запрещенных;

б) вероятность возбуждения очень быстро убывает с увеличением угла рассеяния. При малых углах рассеяния возбуждение уровня 2^1P более вероятно, нежели упругое столкновение; в случае больших углов имеет, однако, место обратное;

с) неупругим рассеянием можно пренебречь при

$$K a_0 \gg Z,$$

как это следует из формул (17), (18) и (19), показывающих, что при этом условии вероятность возбуждения S -, P - и D -состояний убывает соответственно как K^{-12} , K^{-14} , K^{-16} .

Принимая во внимание, что $\frac{Z e^2}{a_0}$ представляет собой ионизационный потенциал атома, мы можем сказать, что дифференциальным сечением для неупругих столкновений можно пренебречь при условии

$$K \gg V_i / e^2,$$

где V_i — ионизационный потенциал рассматриваемого атома. Этот результат может быть обобщен на случай любого атома.

В таблице I приведены значения $2\pi I_{0n}(\theta)$ при различных скоростях столкновения и различных углах рассеяния для случая неупругих столкновений электронов с атомами гелия. Как это следует из теоретических соображений, формулы, получаемые с помощью первого приближения теории Борна, не могут быть рассматриваемы как очень точные даже для столкновений с электронами, обладающими энергией в 200 В; сравнение с опытным материалом указывает, однако, на общее хорошее согласие с теоретическими предположениями.

Опыты были произведены Даймондом и Ватсоном ¹⁾ для электронов с энергией 200 В, Мак-Милленом ²⁾ для электронов с энергией 100 В и Мором и Николлом ³⁾ для электронов с энергиями 54, 83, 120 и

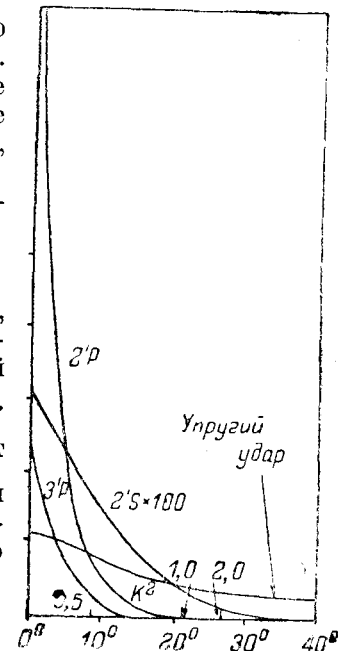


Рис. 30. Угловое распределение электронов в 200 вольт, рассеянных в гелии

¹⁾ Massey and Mokr, Proc. Roy. Soc. A., 132, 605, 1931.

¹⁾ Dymond and Watson, Proc. Roy. Soc. A., 122, 571, 1929.

²⁾ Mc Millen, Phys. Rev., 36, 1034, 1930.

³⁾ Mohr and Nicoll, Proc. Roy. Soc. A., 138, 229, 1932.

196 V, как это можно видеть из рис. 31. Наблюденные ими угловые распределения электронов, возбуждавших уровень $2P$, хорошо согласуются с теоретическими данными. Для столкновений с более медленными электронами (с энергией, меньшей 80 V) хорошего согласия с опытом при больших углах рассеяния не получается [как это и следовало ожидать (см. § 5. 2)]. Сравнение теоретических и экспериментальных ¹⁾ данных для электронов, неупруго рассеянных атомами водорода, приводит к аналогичным результатам (теоретические данные относятся к атомному водороду, опыты же были произведены для молекулярного водорода, однако, как это показано нами в главе XII, при рассматриваемых скоростях столкновений это обстоятельство не играет существенной роли).

Таблица I
Эффективное сечение $2\pi I(\theta)$ в единицах πa_0^2 .
Угол рассеяния

Возбуждаемое состояние и энергия возбуждающих электронов в вольтах	0°	5°	10°	20°	30°	40°
1^1S 100	0,99	0,98	0,92	0,79	0,61	0,45
200	0,99	0,97	0,88	0,65	0,41	0,25
400	0,99	0,95	0,77	0,45	0,22	0,10
2^1S 100	0,126	0,120	0,086	0,049	0,020	0,0063
200	0,155	0,126	0,086	0,024	0,0039	0,0,68
400	0,166	0,120	0,057	0,0051	0,0,386	0,0,43
2^1P 100	7,8	4,4	1,78	0,32	0,056	0,013
200	17,7	4,5	0,99	0,068	0,0088	0,0,7
400	39	2,6	0,33	0,009	0,0003	0,0,2
3^1P 100	1,84	1,20	0,45	0,103	0,021	0,0043
200	4,5	1,33	0,24	0,027	0,0025	0,0,28
400	9,7	0,81	0,084	0,0035	0,0,14	0,0,8
3^1D 100	0,0109	0,0098	0,0070	0,0028	0,0,7	0,0,14
200	0,0132	0,010	0,0052	0,0,86	0,0,8	0,0,7
400	0,0142	0,0094	0,0023	0,0,11	0,0,3	0,0,1
4^1P 100	0,68	0,46	0,215	0,043	0,0092	0,0020
200	0,71	0,52	0,131	0,011	0,0012	0,0,13
400	3,7	0,33	0,048	0,0015	0,0,6	0,0,4

¹⁾ Теоретические данные для атомного водорода см. у *Elsasser*, Zs. f. Phys., 45, 522, 1926, *Bethe*, Ann. d. Phys., 5, 325, 1930, *Goldstein*, Theses, Paris, 1932. Экспериментальные — у *Harnwell*, Phys. Rev., 34, 661, 1929; *Hughes and Mc Millen*, Phys. Rev., 41, 39, 1932; *Mohr and Nicoll*, Proc. Roy. Soc. A., 138 9, 1932.

различных P -уровней также находятся в хорошем согласии с теорией. Опыты ван-Атта относятся лишь к электронам, рассеянным под углами от 0° до 1°40'; наблюдаемые изменения интенсивности при изменении скорости электронов, возбуждающих уровень 2^1P , находятся при этом в согласии с приведенными в таблице I данными; при увеличении скорости наблюдается монотонное возрастание интенсивности.

Имеет место, таким образом, хорошее совпадение теоретических и экспериментальных данных. Дальнейшее сравнение с экспериментальными данными будет произведено в § 3 в связи с вычислением полных сечений. Сейчас мы займемся определением дифференциальных сечений, соответствующих возбуждению уровней непрерывного спектра (ионизации атома).

§ 2. 2. Возбуждение уровней непрерывного спектра. Ионизация. При экспериментальном исследовании ионизирующих столкновений невозможно отличить друг от друга рассеянные и испускаемые электроны. Если измерение производится для электронов, обладающих после столкновения определенной энергией E' , то мы будем иметь дело не только с электронами, рассеянными с потерей энергии $E - E'$, но также и с электронами, выброшенными из атомов с энергией E' (E — энергия падающего электрона). При рассмотрении результатов эксперимента в общем случае необходимо принять во внимание интерференцию этих двух групп электронных волн ¹⁾; при некоторых определенных условиях эта интерференция оказывается, однако, малой и мы можем воспользоваться приближенной теорией, не учитывающей интерференционных явлений. При вычислении вероятности ионизации атома электронами данной скорости учет эффекта интерференции не является существенным, так что мы можем не принимать его во внимание. В дальнейшем, при рассмотрении углового распределения электронов и распределения их по величине скорости, мы ознакомимся с условиями, при которых интерференцией можно пренебречь.

Волновая функция, соответствующая x -тому состоянию непрерывного спектра водорода для движения электрона в направлении, определяемом полярными углами (χ, ψ) в поле заряда Ze , определяется выражением ²⁾:

$$\psi_x^* = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{n}{1 - e^{-2\pi n}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{e^{ikr}}{\Gamma(1 - in)} \int_0^\infty u^{-in} e^{-u} J_0 \left\{ 2(ix\xi u)^{\frac{1}{2}} \right\} du,$$

где

$$\xi = r(1 + \cos \Theta), \quad \cos \Theta = \cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos(\varphi - \psi),$$

и

$$n = Z/\alpha a_0. \tag{20}$$

¹⁾ См. § 4. 3 главы VIII.

²⁾ *Sommerfeld*, Ann. der Physik, 11, 257, 1931.

Для водорода мы должны положить $Z=1$; получить волновую функцию для гелия, однако, не так просто. В качестве грубого приближения можно воспользоваться водородной функцией возбужденного состояния, положив заряд ядра равным 1,69 (эффективный заряд ядра в нормальном состоянии). Эта функция обладает тем преимуществом, что она ортогональна по отношению к волновой функции нормального состояния: для больших скоростей столкновения, при которых оказывается справедливым первое приближение теории Борна, ошибка будет поэтому во всяком случае невелика.

Подставив эти волновые функции в соотношение (10), мы получаем следующее выражение ¹⁾ для дифференциального сечения, соответствующего выбрасыванию атомного электрона с энергией E_x внутри телесного угла $d\sigma$ в направлении (χ, ψ) относительно первоначального направления падающего электрона, причем последний рассеивается в направлении (θ, φ) внутри телесного угла $d\omega$:

$$I_x(\theta, \varphi; \chi, \psi) d\sigma d\omega dx = C \{ K^4 - 2K^3x \cos \delta + (x^2 + \mu^2) \cos^2 \delta \} \times \\ \times \{ \mu^4 + (K^2 - x^2)^2 + 4\mu^2(K^2 + x^2) \}^{-1} \{ K^2 - 2Kx \cos \delta + \\ + (x^2 + \mu^2) \}^{-4} \times \exp [-2\mu/x \arctg \{ 2\mu x / (x^2 - K^2 - \\ - \mu^2) \}] d\sigma d\omega dx, \quad (21)$$

где δ — угол между вектором $\vec{k}n_0 - \vec{k}_x n_1$ (характеризующим изменение импульса падающего электрона) и направлением (χ, ψ) , $\mu = Z/a_0$, а C есть постоянная, независимая от углов испускания рассеяния.

Отметим, что выражение (21) имеет максимум при $\delta=0$, что соответствует сохранению импульса при столкновении падающего и атомного электронов. Для нахождения углового распределения испускаемых электронов необходимо проинтегрировать выражение (21) по всем углам рассеяния сталкивающегося электрона. Это интегрирование может быть выполнено лишь численно. Типичные получаемые при этом результаты приведены на рис. 31. Максимумы определяются условием

$$k^2 + x^2 - 2kx \cos \chi = k_x^2,$$

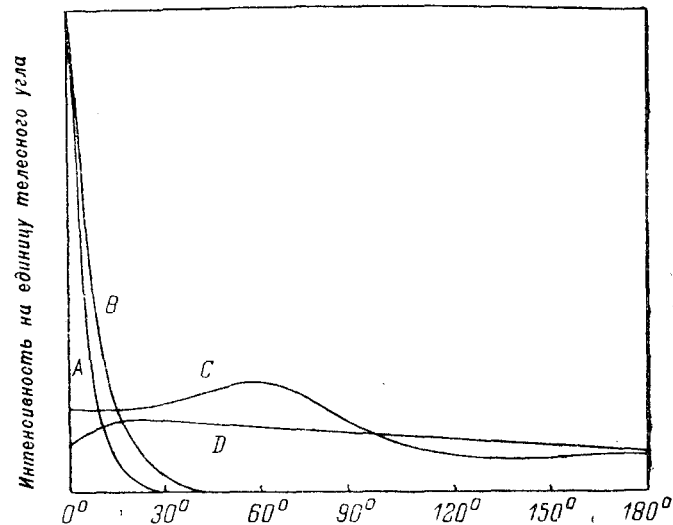
соответствующим сохранению импульса.

Интегрирование по всем углам испускания может быть выполнено аналитически; при этом мы получаем

$$I_x(\theta, \varphi) d\omega dx = \frac{2^4 \pi^4 m^2 \epsilon^4 k_x x}{h^4 k K^2} \frac{\mu^6 \left\{ K^2 + \frac{1}{3}(\mu^2 + x^2) \right\}}{\{ \mu^4 + (K^2 - x^2)^2 + 4\mu^2 Kx \}^3} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{2\mu}{x} \arctg \frac{2\mu x}{K^2 - x^2 + \mu^2} \right\} (1 - e^{-2\pi\mu/x})^{-1} d\omega dx. \quad (22)$$

На рис. 33 приведено угловое распределение рассеянных электронов с энергией в 200 вольт, вычисленное с помощью этой формулы; на рис. 34

приведены кривые, характеризующие зависимость интенсивности от изменения импульса K ¹⁾. Из этих кривых следует, что:

Рис. 33 ²⁾.

а) При малых скоростях вылета атомного электрона интенсивность рассеяния равномерно убывает с возрастанием угла, как и в случае возбуждения дискретных уровней.

б) При больших скоростях вылета атомного электрона угловое распределение имеет резкий максимум в точке:

$$K^2 = x^2, \quad (23)$$

что соответствует сохранению импульса при столкновении атомного и падающего электронов.

в) При больших значениях K вероятность ионизации быстро убывает.

§ 2. 21. Распределение выбрасываемых электронов по скоростям. Распределение выбрасываемых электронов по скоростям мы найдем, проинтегрировав выражение (22) по всем углам рассеяния. Это интегрирование мо-

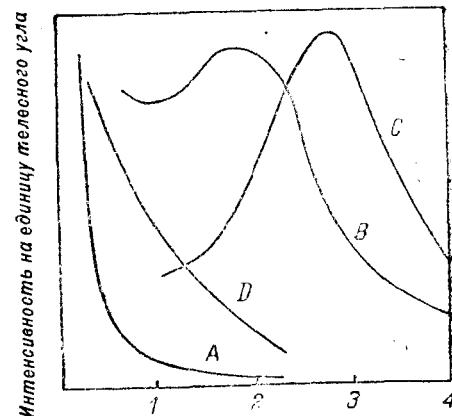


Рис. 34.

¹⁾ А. Пад. эл-н: $k=4,7$, выбр. эл-н $x=0,5$; В. Пад. эл-н $k=4,7$, выбр. эл-н $x=2,0$; С. Пад. эл-н $k=5,9$, выбр. эл-н $x=3,0$; D. Пад. эл-н $k=4,7$, выбр. эл-н $x=1,0$.

²⁾ А. Рассеянные электроны с энергией 176 вольт; В — 63 вольт. С. Выброшенные электроны с энергией 13,6 вольт; D — 0,85 вольт.

жет быть выполнено только численно. На рис. 35 приведены кривые распределения выбрасываемых электронов по скоростям для случая ионизации атомов водорода (цифры дают энергию электронов в вольтах). При ионизации электронами, начальная энергия которых превышает 100 вольт, вероятность ионизации при возрастании скорости выбрасывания сначала быстро возрастает до максимального значения, а затем быстро убывает.

Из резкой асимметрии кривой распределения выбрасываемых электронов по скоростям следует, что интерференция играет существенную роль только для электронов с промежуточными значениями скорости. Общий вид результирующего распределения показан на рис. 35 пунктирной линией¹⁾. Опыты Тейта и Пальмера²⁾ приводят к качественному подтверждению этого результата.

Выясним теперь — при каких условиях при рассмотрении углового распределения можно пренебречь явлением интерференции? Из рис. 35

следует, что для электронов с малым значением энергии угловые распределения сходны по форме с результатами, полученными с помощью формулы (21), тогда как для электронов с большой энергией угловые распределения имеют форму (22), соответствующую рассеянным электронам. Для электронов с промежуточными значениями скорости угловое распределение должно существовать от интерференционных явлений.

В экспериментальной литературе почти не существует относящихся к этому вопросу данных; Тейт и Пальмер показали, однако, что в парах ртути угловое распределение быстрых электронов, создающихся в результате ионизирующих столкновений („рассеянных“ электронов) весьма сходно с распределением электронов, получающихся при возбуждении дискретных уровней — оно убывает очень быстро с увеличением угла рассеяния. Этот результат находится в согласии с приведенной на рис. 33 кривой, построенной на основании теоретических соображений. Для медленных электронов имеет место сравнительно малое изменение интенсивности при изменении угла, как это и следовало ожидать на основании кривых рис. 33 для выбрасываемых электронов, если учесть то обстоятельство, что в этих опытах поток электронов был неоднородным (соответству-

¹⁾ А. Выброшенные электроны. В. Рассеянные электроны. С. Общее число электронов.

²⁾ Tate and Palmer, Phys. Rev., 40, 731, 1932.

интервалу энергии в 30 вольт), что должно было бы сгладить любой максимум, если бы он имел место. Никаких определенных экспериментальных данных, относящихся к интерференционным эффектам, до сих пор получено не было.

§ 2. 3. Угловое распределение неупруго рассеянных электронов.

§ 2. 31. Атомы водорода. Формула (10) определяет дифференциальное сечение, соответствующее данному конечному состоянию n . Если атом водорода находился первоначально в нормальном состоянии, то, произведя суммирование по всем возможным конечным состояниям¹⁾, мы получим:

$$\sum_{n \neq 0} I_{0n}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{h^4 k^2 K^3} \sum_n \left| \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau \right|^2 dK. \quad (24)$$

Разложив $\psi_0 e^{iKx}$ в ряд по атомным волновым функциям, имеем

$$e^{iKx} \psi_0 = \sum_{n \neq 0} \psi_n \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau,$$

и аналогично:

$$e^{-iKx} \psi_0^* = \sum_{n \neq 0} \psi_n^* \int e^{-iKx} \psi_0^* \psi_n d\tau.$$

Перемножив эти уравнения, получаем:

$$|\psi_0|^2 = \left| \sum_n \psi_n \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau \right|^2.$$

Принтегрировав обе части этого уравнения по всему пространству и принимая во внимание ортогональность волновых функций ψ_n , имеем

$$1 = \left| \int e^{iKx} |\psi_0|^2 d\tau \right| + \sum_n \left| \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau \right|^2.$$

Подставив это выражение в ур-ние (24), получаем:

$$\sum_{n \neq 0} I_{0n}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{h^4 k^2} \frac{dK}{K^3} [1 - \{F(K)\}^2], \quad (25)$$

где F — атомный фактор рассеяния [(см. § 1 главы VII, ур-ние (9)] для атома водорода, определяющийся выражением

$$F(K) = \int e^{iKx} |\psi_0|^2 d\tau = \left(1 + \frac{1}{4} K^2 a_0^2 \right)^{-2}.$$

Условием применимости этой формулы является малость членов суммы (24) соответствующих таким переходам $0 \rightarrow n$, которые невозможны с энергетической точки зрения. Для этого K должно быть

¹⁾ Как дискретного спектра, соответствующего возбуждению атома, так и непрерывного, соответствующего его ионизации; при этом для простоты состояния второго типа трактуются как дискретные, что не оказывает влияния на окончательный результат. (Прим. ред.)

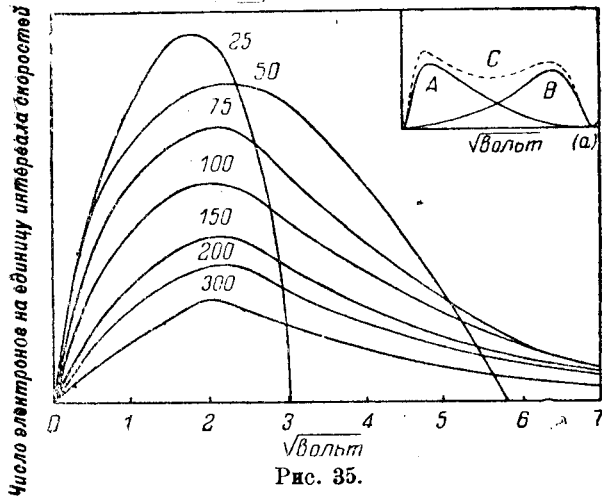


Рис. 35.

больше минимального изменения импульса при переходе к наиболее высокому энергетическому состоянию, вероятность возбуждения которого заметно отличается от нуля; если E_x — энергия этого состояния, то с помощью выражения (13) имеем:

$$K > 4\pi^2 m (E_x - E_0) / kh^2.$$

Вероятность возбуждения (или ионизации) быстро убывает с возрастанием E_x и может считаться малой при условии

$$E_x > -4E_0.$$

Условие применимости формулы (25) имеет, таким образом, следующий вид:

$$K > 20\pi^2 m_n^* |E_0| / kh^2.$$

Если энергия падающего электрона велика по сравнению с энергией возбуждения данного атомного состояния, мы имеем:

$$K^2 = (2k^2 - \lambda_n^2) (1 - \cos \theta) - \frac{1}{4} \frac{\lambda_n^4}{k^2} \cos \theta + \dots,$$

где

$$\lambda_n^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E_n - E_0).$$

Для всех углов θ , подчиняющихся условию

$$\theta \gg \lambda_n^2 / k^2, \quad (26)$$

мы имеем таким образом:

$$K = 2k \sin \frac{\theta}{2}, \quad k_n \approx k. \quad (27)$$

Этот результат не зависит от величины n и может быть использован при условии $E \gg E_n - E_0$, т. е. для малых углов рассеивания. При больших углах мы можем воспользоваться тем обстоятельством, что импульс выброшенного электрона приближенно равняется $\frac{h}{2\pi} K$, так что потерянная падающим электроном энергия

$$E_x - E_0 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} K^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} (k^2 + k_x^2 - 2kk_x \cos \theta).$$

Принимая во внимание, что

$$E_x - E_0 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} (k^2 - k_x^2),$$

получаем

$$K = k \sin \theta, \quad k_x = k \cos \theta. \quad (28)$$

Для малых θ эти формулы тождественны с формулами (27); мы можем, таким образом, пользоваться соотношениями (28) для всех θ , удовлетворяющих условию (26).

Из формул (28) следует, что K и k_x не зависят от энергии возбуждения; мы можем поэтому преобразовать сумму (25), соответствующую

определенному изменению импульса, к сумме, соответствующей определенному углу рассеяния, воспользовавшись для этого соотношением

$$K dk = k k_n \sin \theta d\theta.$$

Мы получаем, таким образом, выражение

$$2\pi \sum_n I_{0n}(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{h^4 k^4} \frac{\cos \theta}{\sin^3 \theta} \left[1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4} k^2 a_0^2 \sin^2 \theta\right)^4} \right] d\theta,$$

сравнивая которое с формулой (9) главы IX для случая упругого рассеяния:

$$2\pi I(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{128\pi^5 m^2 e^4 a_0^4}{h^4} \frac{\left(8 + 4k^2 a_0^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^2}{\left(4 + 4k^2 a_0^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^4} \sin \theta d\theta.$$

Мы видим, что для малых углов рассеяния [удовлетворяющих все же условию (26)]

$$\frac{\sum_n I_{0n}(\theta)}{I(\theta)} = \text{ctg } \theta. \quad (29)$$

При малых углах неупругое рассеяние значительно превышает, таким образом, упругое рассеяние.

Для больших углов получаем:

$$2\pi \sum_n I_{0n}(\theta) = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{h^4 k^4} \text{cosec}^4 \theta,$$

т. е. формулу Рёзерфорда для рассеяния одного электрона другим. Мы должны исправить эту формулу, учтя интерференцию рассеянного и отброшенного электронов. Воспользовавшись формулой (26) главы V при малых значениях $\frac{e^2}{h\nu}$, получаем:

$$2\pi \sum_n I_{0n}(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^4 h^4} \sin \theta \cos \theta (\text{cosec}^4 \theta - \text{cosec}^2 \theta \sec^2 \theta + \sec^4 \theta) = \frac{64\pi^5 m^2 e^4}{k^4 h^4} \frac{4 - 3 \sin^2 2\theta}{\sin^2 2\theta} d\theta. \quad (30)$$

Сравним этот результат с соответствующей формулой для упругого рассеяния:

$$2\pi I(\theta) \sin \theta d\theta \sim \frac{16\pi^5 m^2 e^4}{h^4 k^4} \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin^3 \frac{\theta}{2}} d\theta.$$

Из формул (29) и (30) следует, что неупругое рассеяние преобладает над упругим вблизи 0° и 90° , но может быть меньше упругого рассеяния при промежуточных значениях угла θ .

§ 2. 32. Обобщение на случай сложных атомов. Для получения приближенных результатов для сложных атомов мы воспользуемся приближенными значениями волновых функций, взяв их в виде суммы произведений водородоподобных волновых функций для отдельных электронов, обладающих надлежащей симметрией. Результаты, полученные для атомов водорода, могут быть, таким образом, применены к сложным атомам; мы должны, однако, вычесть члены, соответствующие запрещенным переходам, например с уровня K в какое-либо занятое состояние уровня L . Рассмотрим вероятность перехода из группы nl атома в группу, характеризующуюся индексами $n'l'$. Соответствующее дифференциальное сечение равняется

$$I_{nl, n'l'}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} |\varepsilon_{nl, n'l'}(K)|^2. \quad (31)$$

Если группа nl занята Z_{nl} электронами, \vec{Z}_{nl} которых имеет спины, ориентированные в одном направлении, а \vec{Z}_{nl} — спины, ориентированные в противоположном направлении, мы получаем:

$$I_{nl, n'l'}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} \{Z_{nl} |\varepsilon'_{nl, n'l'}(K)|^2 - \text{члены, связанные с запрещенными переходами}\}. \quad (32)$$

$\varepsilon'_{nl, n'l'}(K)$ относится к волновым функциям отдельных электронов и определяется формулой

$$|\varepsilon'_{nl, n'l'}(K)|^2 = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^{m=l} \left| \int \psi_{nlm} \psi_{n'l'm}^* e^{iKx} d\tau \right|^2. \quad (33)$$

Суммирование является здесь необходимым для учета вырождения по отношению к магнитному квантовому числу. Так как направление спина не может меняться при переходе, то запрещенным переходам соответствует выражение

$$\frac{1}{2l'+1} (\vec{Z}_{nl} \vec{Z}_{n'l'} + \vec{Z}_{nl} \vec{Z}_{n'l'}) |\varepsilon'_{nl, n'l'}(K)|^2.$$

Полагая

$$Z_{nl} = \frac{1}{2l'+1} (\vec{Z}_{nl} \vec{Z}_{n'l'} + \vec{Z}_{nl} \vec{Z}_{n'l'}) = \zeta_{nl, n'l'}, \quad (34)$$

имеем

$$I_{nl, n'l'}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} \zeta_{nl, n'l'} |\varepsilon'_{nl, n'l'}(K)|^2. \quad (35)$$

Применив этот результат ко всей совокупности неупругих столкновений электрона со сложным атомом, мы получаем

$$\sum_{nl} \sum_{n'l'} I_{nl, n'l'}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} \left\{ Z - 2 \sum_{nl} (2l+1) F_{nl}^2(K) - 2 \sum_{nl} \sum_{n'l'} \sum_m \left| \int \psi_{nlm} \psi_{n'l'm} e^{iKx} d\tau \right|^2 \right\}. \quad (36)$$

где F_{nl} представляет собой множитель F , соответствующий группе nl . С помощью этой формулы может быть определено угловое распределение для всей совокупности неупругих столкновений, подобно тому, как это было сделано в § 2. 31; формула эта приводит к полученным нами раньше результатам.

§ 3. Полные сечения.

§ 3. 1. Возбуждение дискретных оптических уровней. Полное сечение, соответствующее возбуждению n -ого квантового состояния данного атома, находившегося первоначально в нормальном состоянии, определяется выражением

$$\int_{K_{\min}}^{K_{\max}} I_{0n}(K) dK. \quad (37)$$

Пределы интегрирования определяются уравнениями (13). Для приближенного вычисления этого интеграла мы воспользуемся тем обстоятельством, что $I_{0n}(K)$ очень мало для тех значений K , при которых

$$K^2 > K_0^2, \quad (38)$$

где

$$K_0^2 = 8\pi^2 m |E_0| / h^2.$$

Если это условие не выполняется, мы можем разложить $I_{0n}(K)$ в ряд по степеням K . Из уравнения (10) следует, что

$$I_{0n}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} \left| \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau \right|^2.$$

Разлагая показательную функцию в ряд, получаем

$$I_{0n}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} \left\{ K^2 |x_{0n}|^2 + \frac{1}{4} K^4 |(x^2)_{0n}|^2 + \dots \right\}, \quad (39)$$

где x_{0n} , $(x^2)_{0n}$, ... — матричные элементы величин x , x^2 , ..., так что

$$(x^s)_{0n} = \int x^s \psi_0 \psi_n^* d\tau.$$

Разложение (39) справедливо в том случае, если условие (38) не выполняется. Если же условие (38) удовлетворяется, то $I_{0n}(K)$

очень мало и им можно пренебречь. Мы можем в таком случае написать:

$$Q_{0n} \approx \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \int_{K_{\min}}^{K_0} \left\{ K^{-1} |x_{0n}|^2 + \frac{1}{4} K |(x^2)_{0n}|^2 + \dots \right\} dK.$$

Для оптически дозволенных переходов первый член этого выражения отличен от нуля и для быстрых электронов он значительно превышает остальные члены. Выполнив интегрирование и воспользовавшись приближенным выражением (13), мы получаем:

$$Q_{0n} \approx \frac{64\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} |x_{0n}|^2 \lg \frac{2mv^2}{E_n - E_0}. \quad (40)$$

Если рассматриваемый переход связан не с дипольным моментом, а с моментом квадрупольным, мы получаем аналогично

$$Q_{0n} \approx \frac{128\pi^7 m^3 e^4}{k^2 h^6} |(x^2)_{0n}|^2 |E_0|. \quad (41)$$

Отметим, что благодаря наличию логарифмического члена эффективные сечения, соответствующие возбуждению оптически дозволенных уровней, с возрастанием скорости столкновения убывают медленнее, нежели сечения, соответствующие оптически запрещенным переходам. Экспериментальные данные, относящиеся к этому вопросу, очень скудны. Некоторые сведения можно получить из измерения функций, характеризующих возбуждение различных спектральных линий. Этот метод был рассмотрен нами в главе IX. Произведенные недавно Лизом¹⁾ и Тиме²⁾ опыты не обнаружили, однако, какого-либо различия между *S*-, *P*- и *D*-уровнями в отношении зависимости вероятности возбуждения от скорости; опыты эти были произведены с атомами гелия для больших скоростей столкновения.

Из формулы (40) следует далее, что при возрастании скорости столкновения большая часть столкновений приходится на долю неупругих, так как при больших значениях скорости сечение, соответствующее упругим столкновениям, убывает как v^{-2} [см. главу IX (10)]. Этот эффект явствует из приведенных в таблице IV этой главы данных.

В таблице II значения сечений, соответствующих возбуждению гелия, вычисленные путем точного интегрирования выражения (18), сравнены с данными об упругих сечениях. Наблюдаемые значения, приведенные для суммы сечений, соответствующих упругому столкновению и возбуждению дискретных уровней, получены путем вычитания наблюдаемых вероятностей ионизации, измеренных Смитом³⁾, из значений полных сечений, определенных Нормандом⁴⁾. При 200 V согласно является

1) Lees, Proc. Roy. Soc. A., 137, 173, 1932.

2) Thime, Zs. f. Physik, 78, 412, 1932.

3) Smith, Phys. Rev., 36, 1293, 1930.

4) Normand, Ibid., 35, 1217, 1930.

весьма удовлетворительным; однако для электронов, энергия которых меньше 150 вольт, приближение Борна перестает быть справедливым.

Сравнение относительных значений сечений для различных переходов со значениями, полученными из оптических данных, будет произведено в § 5. 2, в связи с рассмотрением вопроса о возбуждении триплетных уровней.

Таблица II

Эффективные сечения в единицах πa_0^2 .

Энергия электрона в вольтах	Упругое сечение	Возбуждаемое состояние									
		2S	2P	3P	3D	4P	4D	4F	5P	Сумма	Наблюд.
100	0,375	0,0084	0,107	0,031	0,0,53	0,012	0,0,27	0,0,40	0,0063	0,538	0,67
200	0,205	0,0047	0,069	0,021	0,0,28	0,009	0,0,15	0,0,20	0,0046	0,313	0,31
400	0,107	0,0025	0,047	0,013	0,0,25	0,006	0,0,8	0,0,10	0,0034	0,178	—

§ 3. 2. Возбуждение рентгеновых лучей. При столкновениях электронов со сложными атомами может иметь место выбрасывание электрона из внутренней оболочки атома, сопровождающееся рентгеновым излучением. Интересно поэтому получить приближенные выражения, определяющие вероятность такой ионизации внутренних оболочек. Для этого мы должны вычислить суммы вероятностей всех возможных переходов из рассматриваемой внутренней электронной оболочки.

Для ионизации уровня nl

$$\sum_{n'l'} I_{nl, n'l'}(K) dK = \frac{128\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} \sum_{n'l'} \zeta_{nl, n'l'} |e_{nl, n'l'}(K)|^2. \quad (42)$$

Полное сечение, соответствующее этой ионизации, определяется выражением

$$Q_{nl}^i = \sum_{n'l'} \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} I_{nl, n'l'}(K) dK. \quad (43)$$

Мы можем приближенно вычислить этот интеграл точно так же, как это было сделано нами в предыдущем параграфе для случая оптических уровней. Мы получаем при этом

$$Q_{nl}^i \approx \frac{64\pi^5 m^2 e^4}{k^2 h^4} Z_{nl} \left(\bar{x}_{nl}^2 - \sum_{n'l'} |x_{nl, n'l'}|^2 \right) \lg \left(\frac{2mv^2}{B_{nl}} \right), \quad (44)$$

где B_{nl} — величина порядка энергии ионизации оболочки nl , а \bar{x}_{nl}^2 — одна треть среднего значения квадрата радиуса этой оболочки. Для внешних оболочек члены $\sum_{n'l'} |x_{nl,n'l'}|^2$ малы, и вероятность ионизации оболочки

почти пропорциональна среднему значению квадрата радиуса оболочки; для внутренних оболочек интенсивность запрещенных переходов играет, однако, существенную роль. Бете ¹⁾ получил дальнейшие приближения, воспользовавшись в качестве атомных волновых функций водородоподобными функциями с эффективным зарядом ядра Z_{eff} . При этом для тех внутренних оболочек, наиболее существенные дискретные переходы из которых являются запрещенными, он получил:

$$\bar{x}_{nl}^2 = \sum_{n'l'} |x_{nl,n'l'}|^2 = 0,2 - 0,6n^2 a_0^2 / Z_{eff}^2. \quad (45)$$

Так как энергия E_{nl} оболочки nl равняется

$$E_{nl} = -2\pi^2 m e^4 Z_{eff}^2 / n^2 h^2,$$

то мы имеем окончательно

$$Q_{nl}^i = \frac{2\pi e^4 Z_{nl}}{m v^2 |E_{nl}|} b_{nl} \lg \left(\frac{2mv^2}{B_{nl}} \right), \quad (46)$$

где b_{nl} для внутренних оболочек лежит между 0,2 и 0,6, а для внешних оболочек — порядка n^2 .

Экспериментальных данных, подтверждающих справедливость формулы (46), пока не имеется. Все исследования изменения интенсивности рентгеновых линий с изменением энергии бомбардирующих электронов производились для толстых слоев; для приведения этих данных к соответствующим значениям для тонких слоев потребовалось бы введение сложных поправок. Подробное исследование этих поправок было произведено Вебстером, Кларком и Хансеном ²⁾, применившими полученные ими результаты к функциям возбуждения K -линий серебра от толстого антикатада. Максимальная энергия применявшихся в этих исследованиях электронов только в три раза превышала значение энергии, необходимой для возбуждения; едва ли можно было поэтому ожидать, что формула (46) окажется справедливой. Найдено, действительно, что экспериментальная кривая достигает максимального значения медленнее, нежели построенная с помощью выражения (46) (если считать, что B_{nl} в 4 раза превышает энергию возбуждения). Формула Борна, будучи применена к оптическому возбуждению, также оказывается несправедливой (см. § 5. 2).

§ 3. 3. Первичная ионизация. Воспользовавшись значениями дифференциальных сечений $I_{0x} dx dK$, приведенными нами в § 2. 2 для возбуждения уровня непрерывного спектра, мы можем вычислить (путем

численного интегрирования) полное сечение для ионизации с помощью формулы

$$Q_0^i = \int_0^{x_{\max}} \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} I_{0x}(K) dK dx, \quad (47)$$

где $x_{\max}^2 = k^2 - 8\pi^2 m |E_0| / h^2$.

Результаты подобного вычисления приведены на рис. 36 и 37 для ионизационных сечений водорода и гелия (по оси абсцисс отложена энергия электрона в вольтах, по оси ординат — эффективное сечение в единицах πa_0^2).

На этих рисунках сравнены также экспериментальные кривые с кривыми теоретическими. Наиболее поздние экспериментальные исследования были произведены Смитом и Тейтом ¹⁾ для молекулярного водорода и Смитом ²⁾ для гелия. С целью сравнения мы предполагаем, что молекула водорода будет вести себя подобно двум атомам.

Согласие с теоретическими предположениями вполне удовлетворительно, если принять во внимание, что сравниваются как величины сечений, так и зависимость от скорости, и что получение приближенных волновых функций, характеризующих ионизованные состояния атомов, отличных от атомов водорода, является весьма затруднительным. Для электронов, энергии которых меньше 200 вольт, теоретические значения сечений оказываются слишком большими; однако при столь низких значениях энергии расхождение не является удивительным, как это будет показано в дальнейшем (см. § 5. 2). Отметим, что на основании упрощенных теоретических предположений мы снова получаем слишком быстрое возрастание вероятности ионизации при возрастании энергии падающего электрона выше значения ионизационного потенциала, подобно тому, как это имеет место для случая рентгеновых лучей и оптического возбуждения.

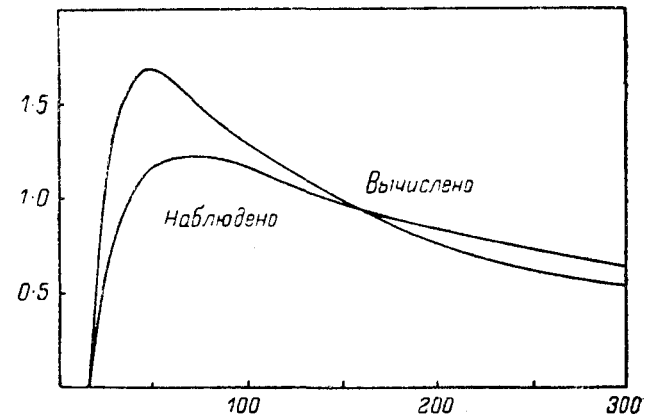


Рис. 36.

¹⁾ *Beihe, Ann. d. Phys.*, **5**, 325, 1930.

²⁾ *Webster, Clark and Hansen, Phys. Rev.*, **37**, 115, 1931, и **43**, 839, 1933.

¹⁾ *Smith and Tate, Phys. Rev.*, **39**, 270, 1932.

²⁾ *Smith, Ibid*, **36**, 1293, 1930.

§ 3. 31. Вероятность ионизации при больших скоростях столкновений ¹⁾. В силу сложности вышеупомянутых вычислений при больших значениях скоростей столкновений получение приближенных формул представляет в этом случае существенный интерес. На рис. 35 этой главы приведены кривые, иллюстрирующие зависимость интеграла:

$$\int_{K_{\min}}^{K_{\max}} I_{0x}(K) dK \quad (48)$$

от x при различных скоростях столкновения.

Из рисунка следует, что основную роль для вероятности ионизации играют переходы, относящиеся к очень малым значениям x . Для таких

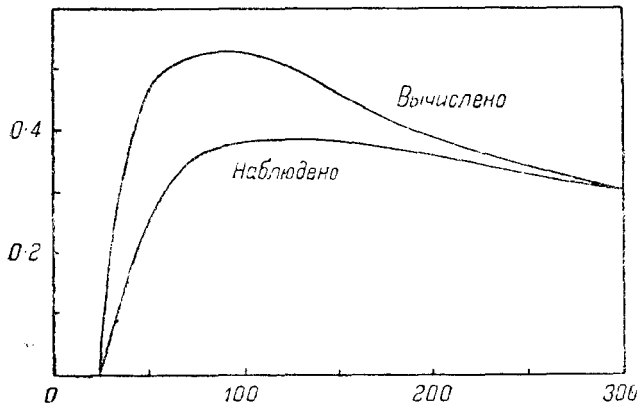


Рис. 37.

переходов, связанных с большими значениями K . Мы можем, следовательно, аппроксимировать значение Q_0^i точно таким же образом, как и в случае возбуждения дискретных состояний. Воспользовавшись этим методом, получаем

$$Q_{nl}^i = \frac{64\pi^5 m^2 \varepsilon^4}{h^4 k^2} Z_{nl} \int dx |x_{nl,x}|^2 \lg \left(\frac{2mv^2}{C_{nl}} \right), \quad (49)$$

где C_{nl} — величина порядка энергии оболочки. С помощью методов, аналогичных методам рассмотрения возбуждения рентгеновых лучей, Бете ²⁾ показал, что выражение (49) сводится к

$$Q_{nl}^i = \frac{2\pi \varepsilon^4}{mv^2} \frac{c_{nl}}{|E_{nl}|} Z_{nl} \lg \left(\frac{2mv^2}{C_{nl}} \right), \quad (50)$$

¹⁾ Под большой скоростью подразумевается скорость, превышающая 1000 электрон-вольт, но такая, при которой релятивистские эффекты еще не играют существенной роли.

²⁾ Bethe, Ann. der Phys., 5, 325, 19

где

$$c_{nl} = (Z_{eff}^2 / n^2 a_0^2) \int |x_{nl,x}|^2 dx.$$

Воспользовавшись в качестве приближения водородоподобными волновыми функциями, мы получим следующие значения c_{nl} для различных оболочек:

Таблица III

Оболочка	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f
c_{nl}	0,28	0,21	0,13	0,17	0,14	0,07	0,15	0,13	0,09	0,04

Эти цифры показывают, что оболочки с наибольшими значениями азимутальных квантовых чисел являются наиболее трудно ионизируемыми.

Для водорода, в частности, могут быть произведены точные вычисления Q^i ; эффективное сечение, соответствующее ионизации, равняется

$$Q_0^i = 0,285 \frac{2\pi \varepsilon^4}{|E_0| mv^2} \lg \left(\frac{2mv^2}{0,048 |E_0|} \right), \quad (51)$$

откуда следует, что C_{nl} равно одной десятой энергии ионизации оболочки nl .

§ 3. 32. Сравнение с классической теорией и с опытными данными. Классическая формула Томсона ²⁾ по форме несколько отлична от выражения (50), так как она не содержит логарифмического члена. Она имеет следующий вид:

$$Q_0^i = \frac{2\pi \varepsilon^4}{mv^2} \frac{Z_{nl}}{|E_{nl}|}. \quad (52)$$

В силу этого различия классического и квантового выражений сравнение с опытными данными представляет существенный интерес. Лучше всего провести это сравнение для случая водорода; применение приближенных волновых функций не может привести при этом к серьезным ошибкам, так как весьма мало вероятно, что существует какое-либо существенное различие между молекулой и атомом водорода, за исключением величины потенциала ионизации. Для последнего мы будем брать его молекулярное значение (16 V). Согласно опытам Виллиамса и Терру ³⁾ при $v = 0,54$ с число ионов, создаваемых на одном сантиметре пути при нормальных температуре и давлении составляет 12,6. Формула (51) дает для этого случая 14,7; классическая же формула (52) — 3,5. Квантово-теоретическая формула приводит, таким образом, к значительно лучшему совпадению с опытными данными.

¹⁾ Bethe, loc. cit.

²⁾ J. J. Thomson, Phil. Mag., 23, 449, 1912.

Williams and Terroux, Proc. Roy. Soc. A., 126, 289, 1930.

§ 3. 4. Распределение различных типов столкновений для случая быстрых электронов. В таблице IV¹⁾ приведены значения относительных вероятностей различных типов столкновений быстрых электронов с атомами водорода. При этом учтены также все релятивистские поправки (см. § 2 главы XV).

Таблица IV

Тип столкновения	Энергия падающего электрона в вольтах					
	1 000	10 000	100 000	10 ⁶	10 ⁸	10 ¹⁰
	Процент общего числа столкновений					
Упругое столкновение	8,7	6,5	5,1	4,1	2,55	1,8
Возбуждение уровней с $n = 2$. . .	42,8	45,3	47,5	49,5	51,5	52,8
Возбуждение уровней с $n = 3$. . .	6,3	7,0	7,3	7,8	8,1	8,4
Возбуждение уровней с $n = 4$. . .	2,41	2,60	2,71	2,79	2,90	2,96
Возбуждение уровней с $n = 5$. . .	1,17	1,24	1,28	1,32	1,36	1,38
Возбужд. более высоких уровней . . .	2,17	2,28	2,33	2,38	2,42	2,45
Все дискретные уровни возбужд.	54,8	58,4	61,2	63,4	66,4	68,0
Ионизация	36,5	35,1	33,7	32,5	31,0	30,2
Потеря энергии на первичный ион в вольтах . . .	51,4	59,9	64,8	66,9	68,6	69,4
Потеря энергии на столкновение в вольтах . . .	18,7	21,0	21,7	21,7	21,3	21,0
Полное эффективное сечен. в единицах 10^{-20} см ² . . .	3 200	426	66,0	30,6	42,8	60,0

§ 4. Вычисление задерживающей способности вещества для быстрых электронов

§ 4. 1. Вспомогательные теоремы. § 4. 11. Обобщенные вероятности перехода и интенсивности осцилляторов. При вычислении полной потери энергии электронов на сантиметре пути при прохождении их через какое-либо вещество оказывается удобным определить некоторые вспомогательные величины, связанные с различ-

¹⁾ Бете, Квантовая механика простейших систем, ГГТИ, 1934, стр. 337.

ными переходами. Эти величины представляют собой обобщение величин, связанных с оптическими переходами.

Вероятность оптического перехода с m -ого уровня на n -ый определяется следующим выражением:

$$\varphi_{mn} = 16\pi^4 m^2 e^4 |x_{mn}|^2 / h^4. \quad (53)$$

Обобщим его, положив

$$\varphi_{mn}(K) = \frac{16\pi^4 m^2 e^4}{h^4 K^2} |\varepsilon_{mn}(K)|^2.$$

При неизменности импульса эта функция сводится к функции (53). С вероятностью оптического перехода $\varphi_{mn}(0)$ связана интенсивность осциллятора f_{mn} , определяющаяся выражением

$$f_{mn} = R^{-1} \nu_{mn} \varphi_{mn},$$

где R — постоянная Ридберга, а ν_{mn} — частота данного перехода. Обобщенная интенсивность осциллятора, соответствующая переходу $m \rightarrow n$, определится, таким образом, выражением

$$f_{mn}(K) = (E_m - E_n) \frac{8\pi^2 m}{K^2 h^2} |\varepsilon_{mn}(K)|^2.$$

Отметим, что дифференциальное сечение, соответствующее переходу $0 \rightarrow n$, равняется

$$I_{0n}(K) dK = \frac{16\pi^3 m e^4}{k^2 h^2} \frac{1}{E_0 - E_n} f_{0n}(K) \frac{dK}{K}.$$

Потеря энергии на сантиметр пути при прохождении электронов через газ, содержащий N атомов в 1 см³, равна таким образом [см. ур-ние (60)]:

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{16\pi^3 m e^4 N}{k^2 h^2} \sum_n \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} f_{0n}(K) \frac{dK}{K}. \quad (54)$$

§ 4. 12. Теорема сложения обобщенных интенсивностей осцилляторов. а) *Водородоподобные атомы*. Рассмотрим величину:

$$\sum_n f_{0n}(K) = \frac{8\pi^2 m}{K^2 h^2} \sum_n (E_0 - E_n) \left| \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau \right|^2.$$

Функции ψ_0 и ψ_n^* удовлетворяют уравнениям:

$$\nabla^2 \psi_0 + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E_0 - V) \psi_0 = 0 \quad (55. 1)$$

$$\nabla^2 \psi_n^* + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E_n - V) \psi_n^* = 0. \quad (55. 2)$$

Умножив уравнение (55. 1) на ψ_n^* , а ур-ние (55. 2) на ψ_0 , вычтя один результат из другого и проинтегрировав по всему пространству, получим

$$(E_0 - E_n) \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \int (\psi_0 \nabla^2 \psi_n^* - \psi_n^* \nabla^2 \psi_0) e^{iKx} d\tau.$$

Правая часть этого выражения сводится к

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left\{ -2iK \int \frac{\partial \psi_0}{\partial x} \psi_n^* e^{iKx} d\tau + K^2 \int \psi_0 \psi_n^* e^{iKx} d\tau \right\}. \quad (56)$$

Далее

$$\sum_n \left[\int \frac{\partial \psi_n}{\partial x} \psi_0^* e^{iKx} d\tau \right] \left[\int \psi_n \psi_0^* e^{-iKx} d\tau \right] = \int \frac{\partial \psi_0}{\partial x} \psi_0^* d\tau = 0,$$

как это может быть доказано с помощью метода, аналогичного рассмотренному в § 2. 3.

Мы имеем, таким образом:

$$\begin{aligned} \frac{8\pi^2 m}{K^2 \hbar^2} \sum_n (E_0 - E_n) \left| \int e^{iKx} \psi_0 \psi_n^* d\tau \right|^2 &= \sum_n \left| \int \psi_n \psi_0^* e^{iKx} d\tau \right|^2 = \\ &= \left| \int |\psi_0|^2 d\tau \right|^2 = 1. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что

$$\sum_n f_{0n}(K) = 1. \quad (57)$$

б) *Сложные атомы.* В качестве обобщения предыдущих формул определим сумму интенсивностей осцилляторов для некоторой оболочки данного атома. При этом мы будем пользоваться, как и прежде, водородоподобными волновыми функциями; единственное различие будет заключаться в том, что мы будем учитывать интенсивности осцилляторов для запрещенных переходов (переходов в уже заполненные уровни). Сумма интенсивностей осциллятора для оболочки nl равняется

$$f_{nl} = \sum_{n'l'} f_{nl, n'l'} = Z_{nl} - \sum_{n'l'} \frac{\vec{Z}_{nl} \vec{Z}_{n'l'} + \overleftarrow{Z}_{nl} \overleftarrow{Z}_{n'l'}}{2l' + 1} f'_{nl, n'l'}, \quad (58)$$

где $f'_{nl, n'l'}$ — интенсивность осциллятора для отдельного электронного перехода с уровня nl на уровень $n'l'$. Второй член выражения (58) представляет собой сумму интенсивностей осциллятора для запрещенных переходов. В частности, если все оболочки $n'l'$ заполнены, то

$$\vec{Z}_{n'l'} = \overleftarrow{Z}_{n'l'} = 2l' + 1$$

и следовательно:

$$f_{nl} = Z_{nl} \left(1 - \sum_{n''l''} f'_{nl, n''l''} \right). \quad (59)$$

Интересно отметить, что

$$\sum_{nl} f_{nl} = Z.$$

Для внутренних оболочек сложного атома сумма интенсивностей осциллятора меньше, нежели число электронов в оболочке; для внешних оболочек она больше.

Воспользовавшись водородными волновыми функциями, Бете ¹⁾ составил таблицу приближенных значений интенсивностей осцилляторов для оболочек различных атомов периодической системы (см. стр. 212).

§ 4. 2. Вычисление задерживающей способности.

§ 4. 21. Водород. Для электрона, проходящего через газ, содержащий N атомов в 1 см^3 , потеря энергии на сантиметр пути, $-\frac{dT}{dx}$, определяется выражением:

$$-\frac{dT}{dx} = N \sum_n \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} (E_0 - E_n) I_{0n}(K) dK,$$

сводящимся к [см. ур-ние (54)]

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{16\pi^3 m \varepsilon^4 N}{k^2 \hbar^2} \sum_n \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} f_{0n}(K) \frac{dK}{K}. \quad (60)$$

Для вычисления этой суммы мы не можем воспользоваться теоремой сложения (57), так как K_{\min} является функцией от n ; мы разобьем поэтому наш интеграл на два интеграла: от K_{\min} до K_0 и от K_0 до K_{\max} , где

$$K_0 = \left\{ \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2} |E_0| \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (61)$$

На первый взгляд учет изменения импульса, превышающего величину (61), представляется излишним, так как в предыдущих параграфах было показано, что для больших значений K величина $I_{0n}(K)$ очень мала; переходы, при которых имеет место значительное изменение импульса, связаны однако с большой потерей энергии и характеризующие их члены играют, таким образом, значительную роль в сумме (60). Мы покажем в дальнейшем, что оба интервала приблизительно равноценны. Обозначим соответствующие им потери энергии на 1 см пути через E' и E'' .

¹⁾ loc. cit.

Таблица V

Интенсивности осцилляторов $f_{nl}(0)$ для оболочек различных атомов

	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	A	Cu	Kr	Ag	Xe	Au
1s	1,000	0,931	0,861	0,792	0,723	0,653	0,584	0,584	0,584	0,505	0,505	0,476	0,476	0,463	0,463
2s	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	0,565	0,565	0,462	0,462	0,420	0,420
2p	—	1,136	1,136	1,136	1,136	1,136	1,136	1,120	1,122	1,122	0,426	0,423	0,301	0,300	0,256
3s	—	—	—	—	—	—	—	1,040	1,040	1,040	1,040	0,566	0,566	0,446	0,446
3p	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1,171	1,171	1,138	0,533	0,526	0,387
3d	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1,418	1,418	1,407	1,407	1,405	0,408
4s	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1,103	1,103	0,560	0,422
4p	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1,220	1,220	1,070	0,450
4d	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1,437	1,437	1,461	1,461
4f	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1,712

Для вычисления E' — потери энергии при переходах с малым изменением импульса — мы разложим e^{iKx} в ряд по степеням K , как это сделано в уравнении (39). Мы получим при этом

$$E' = \frac{128\pi^5 m^2 N \epsilon^4}{k^2 h^4} \sum_n (E_n - E_0) |x_{0n}|^2 \int_{K_{\min}}^{K_0} \frac{dK}{K}. \quad (62)$$

Мы можем теперь воспользоваться формулой

$$\frac{8\pi^2 m}{h^2} \sum_n (E_n - E_0) |x_{0n}|^2 = 1,$$

дающей

$$E' = \frac{16\pi^3 m N \epsilon^4}{k^2 h^2} \left\{ \lg K_0 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} \sum_n (E_n - E_0) |x_{0n}|^2 \lg K_{\min} \right\}. \quad (63)$$

Мы имеем дело с быстрыми электронами; можно поэтому воспользоваться приближенным выражением для K_{\min} , полученным нами в § 1. 1:

$$K_{\min} = 4\pi^2 m (E_n - E_0) / kh^2.$$

Подставив это выражение в (63) и воспользовавшись тем, что

$$-E_n = 2\pi^2 m \epsilon^4 / h^2 n^2 = Rh/n^2, \quad -E_0 = 2\pi^2 m \epsilon^4 / h^2 = Rh,$$

получаем окончательно

$$E' = \frac{16\pi^3 m N \epsilon^4}{k^2 h^2} \left\{ \lg K_0 - \frac{8\pi^2 m R}{h} \sum_n \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) |x_{0n}|^2 \lg \frac{4\pi^2 m R}{kh} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \right\} \quad (64)$$

Для потери энергии E'' , связанной с большими изменениями импульса, получаем:

$$E'' = \sum_n \int_{K_0}^{K_{\max}} (E_n - E_0) I_{0n}(K) dK. \quad (65)$$

Воспользовавшись теоремой сложения (57), паходим

$$E'' = \frac{16^3 m \epsilon^4 N}{k^2 h^3} \int_{K_0}^{K_{\max}} \frac{dK}{K}.$$

При определении K_{\max} существенно отметить, что значения $I_{0n}(K)$, даваемые теорией Борна, несправедливы, если изменение импульса очень велико. Мы не можем поэтому подставить выражение (13) для K_{\max} в формулу (65), а должны воспользоваться условием сохранения импульса при столкновении между падающим и атомным электронами. Так как массы обоих электронов равны, максимальное значение импульса, которое может быть получено атомным электроном, равняется половине полного значения импульса. Положим поэтому,

$$K_{\max} \approx k.$$

Выполнив интегрирование, получаем

$$E'' = \frac{16\pi^3 m^2 N \epsilon^4}{k^2 h^4} \{ \lg k - \lg K_0 \}. \quad (66)$$

Сложив выражения (66) и (64), находим полную потерю энергии на 1 см пути

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{16\pi^3 m^2 N \epsilon^4}{k^2 h^2} \left\{ \lg \frac{k^2 h^2}{4\pi^2 m R h} - \sum_n |x_{0n}|^2 \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) \lg \frac{n^2 - 1}{n^2} \right\}. \quad (67)$$

Суммирование может быть выполнено численно с помощью обычной формулы для матричных элементов x_{0n} . Окончательный результат:

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi\epsilon^4 N}{mv^2} \lg \frac{mv^2}{cRh} \quad (c = 1,105). \quad (68)$$

§ 4. 22. Сложные атомы. Пользуясь водородными функциями и учитывая запрещенные переходы, можно обобщить формулу (68) для случая сложных атомов. Подобное обобщение было дано Бете, который нашел, что

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi\epsilon^4 N}{mv^2} \sum_{nl} f_{nl}(0) \left\{ \lg \frac{mv^2}{|E_{nl}|} + \frac{1}{f_{nl}(0)} \sum_{n'v'} \zeta_{nl} f_{n'l,n'v'}(0) \lg \frac{|E_{nl}|}{E_{n'v'} - E_{nl}} \right\}, \quad (69)$$

где $\zeta_{n'l} f_{n'l,n'v'}$ — величины, определяемые формулами (34), (53) и (58), а $f_{nl}(0)$ — предел обобщенной интенсивности осцилляторов при неизменности импульса, т. е. обычное значение интенсивности осцилляторов. Определяя среднее значение энергии возбуждения A_{nl} оболочки nl с помощью формулы

$$f_{nl}^{(0)} \lg A_{nl} = f_{nl}^{(0)} \lg |E_{nl}| + \sum_{n'v'} \zeta_{nl} f_{n'l,n'v'}^{(0)} \lg \frac{E_{n'v'} - E_{nl}}{|E_{nl}|},$$

мы получаем следующее выражение для задерживающей способности:

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi\epsilon^4 N}{mv^2} \sum_{nl} f_{nl}^{(0)} \lg \frac{mv^2}{A_{nl}}.$$

Определив, далее, среднюю энергию возбуждения E формулой:

$$Z \lg E = \sum_{nl} f_{nl} \lg A_{nl}$$

получаем

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi\epsilon^4 N}{mv^2} Z \lg \frac{mv^2}{E}. \quad (70)$$

При количественных подсчетах затруднительным является определение значения E . Приведенные в таблице V значения интенсивностей осцилляторов для легких элементов являются приближенными, для тяжелых — весьма неточными. Блох¹⁾ попытался устранить эту трудность с помощью статистической модели атома Томаса—Ферми. Он вычислил задерживающую способность, рассматривая возмущение такого „газообразного сферического“ атома внешними силами, и получил при этом следующую формулу.

$$-\frac{dT}{dx} = \frac{4\pi\epsilon^4 N}{mv^2} Z \lg \frac{mv^2}{Z_l R h}. \quad (71)$$

Постоянная χ может быть определена с помощью некоторых дифференциальных уравнений, характеризующих поле атома согласно теории Томаса—Ферми. Эти уравнения не решены; Блох показал, однако, что зависимость E от Z , определяемая выражением (71), находится в согласии с опытными данными. Эмпирическое значение χ , дающее наилучшее численное согласие с наблюдаемыми значениями $-\frac{dT}{dx}$, также является вполне правдоподобным.

§ 4. 23. Сравнение с экспериментальными данными. Формулы (68) и (70), определяющие потерю энергии быстрых электронов на 1 см пути в (атомном) водороде и других газах были исчерпывающе рассмотрены Виллиамсом²⁾. При сравнении теоретических и экспериментальных данных необходимо увеличить полученные результаты приблизительно на 10%, чтобы учесть то обстоятельство, что первичными считаются те электроны, которые после столкновения обладают большей энергией. Принимая во внимание эту поправку, получаем очень хорошее согласие с опытными данными (см. таблицу VI, стр. 216). Эта таблица содержит также величины, получаемые согласно классической теории Бора³⁾. Так как применимость первого приближения Борна, которым мы пользовались в вышеизложенной теории, зависит от того, больше ли скорость первичных электронов v нежели орбитальная скорость атомных электронов u (см. § 5. 1 главы IX), — в таблице приведены значения отношения квадратов этих скоростей $\frac{u^2}{v^2}$.

Дополнительные данные, подтверждающие результаты применения квантовой теории к вычислению задерживающей способности вещества для быстрых заряженных частиц, будут приведены в главе XIII при рассмотрении прохождения тяжелых частиц через материю.

§ 4. 24. Относительная роль слабых и сильных столкновений в торможении быстрых элементов. В § 3. 31 было показано, что число первичных ионов s_0 , создаваемых на 1 см пути, определяется выражением

$$s_0 = \frac{2\pi N \epsilon^4}{mv^2} \sum_{nl} \frac{c_{nl} Z_{nl}}{(-E_{nl})} \lg \frac{2mv^2}{C_{nl}}, \quad (72)$$

¹⁾ Bloch, Zs. f. Phys., 81, 363, 1933.

²⁾ Williams, Proc. Roy. Soc. A, 135, 108, 1932.

³⁾ Bohr, Phil. Mag. 25, 10, 1913, 30, 53, 1915. Bloch (Ann. d. Phys., 5, 285, 1933) показал, что формула Бора справедлива при малых u^2/v^2 и больших $Z\epsilon^2/hv$.

Таблица VI

v/c	Газ	w^2/v^2	$(\frac{dT}{dx}) / (2\pi N Z e^4 / mv^2)$		
			Наблюд.	Теоретич. значение	
				По Бору	Квант. мех. значение
0,136	H ₂	0,001	11,7	17,1	11,5
0,230	O ₂	0,001—0,07	10,6	18,0	12,2
0,230	A	0,001—0,2	10,0	16,3	11,2

где величины C_{nl} и c_{nl} вычисляются с помощью уравнений (49) и (50). Потеря энергии на один первичный ион равняется таким образом $-\frac{dT}{dx} / s_0$. В азоте для электронов с энергией 30 000 V получаем потерю энергии в 80 V на один первичный ион, в водороде — 100 V. Эти большие значения зависят от того обстоятельства, что больший процент столкновений приводит к возбуждению, а не к ионизации. Роль сильных столкновений (при которых выбрасываются быстрые ¹⁾ электроны) при определении потери энергии на 1 см пути также весьма значительна, благодаря большой потере энергии при таких столкновениях. Она определяется выражением:

$$E'' = \frac{16\pi^3 m^2 N e^4}{k^2 h^4} \sum_{nl} Z_{nl} \int_{K_0}^K \frac{dK}{K} = \frac{8\pi^3 m^2 N e^4}{k^2 h^4} \sum_{nl} Z_{nl} \lg \left(\frac{k^2}{k_0^2} \right), \quad (73)$$

где $k_0^2 \approx 8\pi^2 m |E_{nl}| / h^2$. С помощью выражения (68) находим, что сильные столкновения обуславливают почти половину общей потери энергии.

§ 4.25. Параметрический метод. Для α -частиц и быстрых электронов изменение импульса падающей частицы при неупругих столкновениях обычно мало по сравнению с ее полным импульсом. В таких случаях падающую частицу можно трактовать как движущийся силовой центр. Подобная трактовка допустима, если оказывается возможным построить волновой пакет, размеры которого малы по сравнению с размерами атома и продолжают оставаться малыми при прохождении его через атом, и, далее, если при определении вероятности возбуждения основную роль играют положения атомного электрона, вне траектории волнового пакета.

¹⁾ Энергия которых велика по сравнению с ионизационным потенциалом.

Метод вычисления вероятности перехода рассмотрен в § 2. 2 главы XIV. В общем случае он не является столь удобным, как метод Борна, так как получаемые с его помощью результаты должны быть усреднены по всем значениям параметра столкновений (т. е. „прицельного расстояния“). Легко показать, что оба метода приводят к одному и тому же результату ¹⁾.

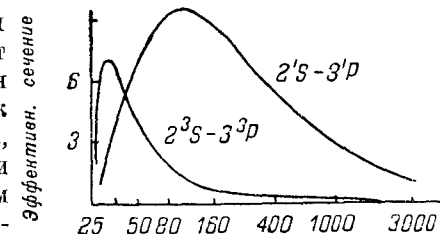
Этот метод интересен тем, что он показывает относительную важность „близких“ и „далеких“ столкновений. Виллиамс ²⁾ показал, что для электрона с энергией 100 000 V, проходящего через водород, из каждых сорока ионизованных или возбужденных атомов только один лежит на пути самого электрона, а четыре — на расстоянии от $2,5 \cdot 10^{-7}$ до 10^{-6} см. Виллиам показал также, что для „далеких“ столкновений квантовая теория дает классическую формулу Бора ³⁾; отклонения от нее наблюдаются лишь для столкновений, при которых частица проходит через атом.

§ 4.26. Многократная ионизация и возбуждение. Следует отметить, что во всех наших рассуждениях мы пренебрегали возможностью многократной ионизации. В том случае, когда волновые функции сложных атомов приближенно полагаются равными произведениям водородоподобных волновых функций, вероятность многократной ионизации равняется нулю; для определения истинного порядка величины этого эффекта необходимо воспользоваться более точными выражениями волновых функций. Весьма мало вероятно, чтобы для легких атомов многократная ионизация играла существенную роль, так как связь между атомными электронами в этом случае мала; для тяжелых атомов этот эффект может, однако, оказаться значительным.

§ 5. Неупругие столкновения медленных электронов с атомами

Для случая медленных электронов теоретическое исследование неупругих столкновений оказывается значительно более сложным, нежели для быстрых частиц. Из экспериментальных данных следует, что в этом случае существенную роль играет электронный обмен. Наблюдения Мора и Николля ⁴⁾, относящиеся к угловому распределению электронов, неупруго рассеянных в парах ртути и аргоне, показывают, что при этом необходимо принять во внимание искажение падающей и выходящей волн силовыми полями нормального и возбужденного атомов (см. ниже § 5.3).

В начале этой главы было указано, что согласно теории Борна вероятность возбуждения уровня, относящегося к системе термов, отличной



Эффективное сечение
Энергия падающих эл-нов в вольтах
Рис. 38.

¹⁾ Mott, Proc. Camb. Phil. Soc. **27**, 553, 1931; Frame, *ibid.*, **27**, 511, 1931.
²⁾ Williams, Proc. Roy. Soc. A., **139**, 163, 1933.
³⁾ Bohr, *loc. cit.*
⁴⁾ Mohr and Nicoll, Proc. Roy. Soc. A., **138**, 229 и 469, 1932.

от системы термов начального состояния, равна нулю. Для случая столкновений с достаточно быстрыми электронами это положение находится в согласии с опытными данными; при очень медленных столкновениях возбуждение таких уровней происходит, однако, столь же часто,

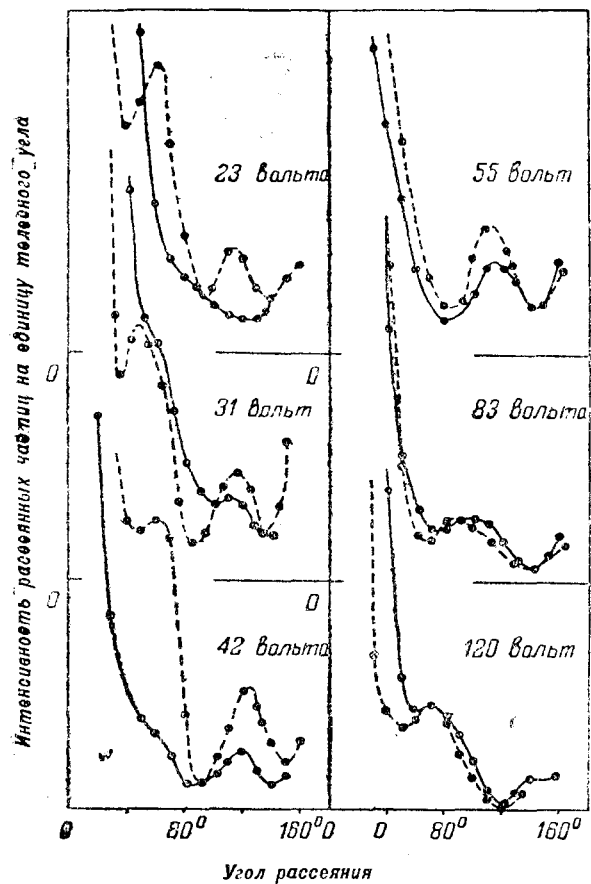


Рис. 39.

а при некоторых значениях скоростей даже чаще, нежели возбуждение уровня, принадлежащего к той же системе термов, что и начальное состояние. На рис. 38 приведены кривые зависимости вероятности возбуждения от скорости электронов для возбуждения уровней 3^1P и 3^3P гелия при исходном состоянии 1^1S . Данные эти были получены Лизом¹⁾ с помощью оптических методов (см. § 1 главы IX). Если энергия возбуждающих электронов превышает 100 В, возбуждение триплетов наблюдается очень редко по сравнению с возбуждением синглетов; однако при значениях энергии, близких к потенциалу возбуждения, может иметь место обратное. Это обстоятельство является общей чертой результатов, относящихся к возбуждению различных двухэлектронных систем²⁾. Во всех случаях кривая триплетного возбуждения очень быстро возрастает до максимума, имеющего место при потенциале приблизительно на 1 В превышающем потенциал возбуждения, тогда как соответствующая синглетная кривая достигает максимума значительно медленнее (за исключением S -состояний). Значения соответствующих максимумов во всех случаях оказываются одного порядка величины.

Если связь между спиновым и орбитальным движением мала, то триплетное возбуждение может иметь место лишь в том случае, когда

¹⁾ Lees, Ibid. 137, 173, 1932.

²⁾ Hughes and Lowe, Proc. Roy. Soc. A., 101, 480, 1923; Skinner and Lees, Nature, 123, 836, 1929; Lees, Proc. Soc. A., 137, 173, 1932 и др.

электронный обмен, имеющий место при столкновении сопровождается изменением симметрии спиновой функции атомных электронов. Из экспериментальных данных следует, что этот процесс электронного обмена является особо существенным для медленных столкновений. Он наблюдается не только при возбуждении уровней другой системы термов, но должен быть принят во внимание также и при рассмотрении синглетного возбуждения.

Интересные результаты были получены Мором и Николлем, исследовавшими угловые распределения электронов с начальными энергиями между 20 и 120 вольт, рассеянных в различных газах в результате возбуждения наиболее вероятного уровня. На рис. 39 приведены кривые для рассеяния в парах ртути; пунктирные кривые относятся к упруго рассеянным электронам, сплошные — к электронам, возбудившим уровень 2^1P . Для более тяжелых газов резко выражены максимальные и минимальные значения. Одинаковый характер дифракционных явлений, наблюдаемых при угловом распределении упруго и неупруго рассеянных электронов при одном и том же значении начальной скорости, показывает, что оба эффекта обусловлены одной и той же причиной — искажением электронных волн полем атома. Этот вопрос будет рассмотрен подробнее в § 5. 3.

§ 5. 1. Применение теории столкновений. Пока еще не существует вполне удовлетворительного метода рассмотрения медленных неупругих столкновений электронов с атомами; с помощью общей теории столкновений, изложенной в главе VIII, мы можем, однако, получить приближенные значения вероятностей этих процессов. Рассеяние электронов, возбудивших n -ое состояние атомов водорода и гелия, может быть описано с помощью двух волновых функций $F_n(\vec{r}_1)$ и $G_n(\vec{r}_2)$, имеющих асимптотическую форму

$$F_n(\vec{r}_1) \sim f_n(\theta_1, \varphi_1) r_1^{-1} \exp(ik_n r_1) \quad (74)$$

$$G_n(\vec{r}_2) \sim g_n(\theta_2, \varphi_2) r_2^{-1} \exp(ik_n r_2).$$

Дифференциальное сечение для возбуждения n -ого состояния определяется, таким образом, следующими выражениями:

$$I_n(\theta) = \frac{1}{4} \frac{k_n}{k} \{ 3 |f_n(\theta, \varphi) + g_n(\theta, \varphi)|^2 + |f_n(\theta, \varphi) - g_n(\theta, \varphi)|^2 \} \text{ для } H \quad (75)$$

$$= \frac{k_n}{k} |f_n(\theta, \varphi) - g_n(\theta, \varphi)|^2 \text{ для } He.$$

В главе VIII было показано [уравнения (61) и (62)], что эти функции удовлетворяют следующим уравнениям:

$$[\nabla_1^2 + k_n^2] F_n(\vec{r}_1) = -\frac{8\pi^2 m e^3}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_2,$$

$$[\nabla_2^2 + k_n^2] G_n(\vec{r}_2) = -\frac{8\pi^2 m e^3}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_1) d\tau_1. \quad (76)$$

Функция Ψ представляет собою решение волнового уравнения, характеризующего поведение системы, состоящей из атома и падающего электрона. Для нахождения решения этих уравнений мы должны, подобно тому, как это было сделано в § 8 главы X, подставить в правую часть выражения (76) какую-либо приближенную форму функции Ψ . Мы положим

$$\Psi = F_0(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) + F_n(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2) + G_n(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_1). \quad (77)$$

Функция $F_0(r)$ характеризует падающую и рассеянную волны и, как было показано в главе II, является решением уравнения

$$\left(\nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00} \right) F_0 = 0. \quad (78)$$

Заметим, что выражение (77) несколько отличается от того приближения, которым мы пользовались в § 8 главы X при рассмотрении упругих столкновений. Включая члены, содержащие ψ_n , мы обеспечиваем в правой части уравнений (76) наличие всех диагональных элементов V_{ss} энергии взаимодействия. Единственные педидиагональные матричные элементы V_{0n} относятся к начальному состоянию атома.

Подставляя функцию (77) в уравнения (76) и пользуясь методом, аналогичным примененному нами при рассмотрении упругих столкновений, получаем уравнение

$$\begin{aligned} & \left[\nabla_1^2 + k_n^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{nn}(r_1) \right] \{ F_n(\vec{r}_1) \pm G_n(\vec{r}_1) \} = \\ & = - \frac{8\pi^2 m \varepsilon^2}{h^2} \left\{ \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \cdot [F_0(\vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) \pm \right. \\ & \left. \pm F_0(\vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) \psi_n^*(\vec{r}_2) + \{ G_n(\vec{r}_2) \pm F_n(\vec{r}_2) \} \cdot \psi_n(\vec{r}_1) \psi_n^*(\vec{r}_2)] d\tau_2 \right\}. \quad (79) \end{aligned}$$

Наличие в правой части равенства третьего члена делает дальнейшее приближение затруднительным, за исключением случая больших скоростей столкновения. В последнем случае в нулевом приближении мы можем пренебречь влиянием атомного поля и положить в правой части равенства (79):

$$F_0(\vec{r}_1) = \exp(i k n_0 \cdot \vec{r}_1), \quad G_n(\vec{r}_2) = 0.$$

При этом мы получим:

$$\begin{aligned} & (\nabla^2 + k_n^2) \{ F_n(\vec{r}_1) \pm G_n(\vec{r}_1) \} = \\ & = - \frac{8\pi^2 m \varepsilon^2}{h^2} \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) \cdot \{ \exp(i k n_0 \cdot \vec{r}_1) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) \pm \\ & \pm \exp(i k n_0 \cdot \vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_1) \psi_n^*(\vec{r}_2) \} d\tau_2. \quad (80) \end{aligned}$$

Решив это уравнение с помощью метода, изложенного в § 4 главы VI, получаем

$$\begin{aligned} & f_n(\theta, \varphi) \pm g_n(\theta, \varphi) = \\ & = \frac{2\pi m \varepsilon^2}{h^2} \int \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) [\exp\{i(k n_0 - k_n n_1) \cdot \vec{r}_1\} \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) \pm \\ & \pm \exp\{i(k n_0 \cdot \vec{r}_2 - k_n n_1 \cdot \vec{r}_1)\} \psi_0(\vec{r}_1) \psi_n^*(\vec{r}_2)] d\tau_1 d\tau_2. \quad (81) \end{aligned}$$

В случае медленных столкновений с атомами, содержащими два электрона, мы имеем дело только с разностями F_n и G_n ; если результирующая вероятность столкновения мала, мы можем пренебречь третьим членом правой части соотношения (81) и получаем, точно так же, как в случае упругого столкновения

$$\begin{aligned} & f_n(\theta, \varphi) - g_n(\theta, \varphi) = \\ & = \frac{2\pi m \varepsilon^2}{h^2} \int \int \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_{12}} \right) [F_0(r_1, \theta_1) \psi_0(\vec{r}_2) \cdot \psi_n^*(\vec{r}_2) \mathfrak{F}_n(r_1, \pi - \Theta_1) - \\ & - \mathfrak{F}_n(r_1, \pi - \Theta_1) F_0(r_2, \theta_2) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_1)] d\tau_1 d\tau_2, \quad (82) \end{aligned}$$

где $\mathfrak{F}_n(r, \theta)$ — решение однородного уравнения:

$$\left[\nabla^2 + k_n^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{nn}(r) \right] \mathfrak{F}_n(r, \theta) = 0,$$

имеющее асимптотическую форму:

$$\mathfrak{F}_n(r, \theta) \sim \exp i k_n r + r^{-1} \exp i k_n r \times \text{функцию от } \theta, \varphi$$

и

$$\cos \Theta_1 = \cos \theta \cos \theta_1 + \sin \theta \sin \theta_1 \cos(\varphi - \varphi_1).$$

Представляется интересным дать физическую интерпретацию соотношений (81) и (82). Первый член характеризует рассеянные волны, второй — электронный обмен. Оба эти члена имеют надлежащую форму, представляя собой интегралы от энергии взаимодействия по волновым функциям начального и конечного состояний системы. Формула (82) отличается от формулы (81) тем, что в первой учитывается воздействие потенциального поля V_{nn} на выходящую волну и воздействие поля V_{00} на падающую волну.

Прежде чем перейти к применению этих формул, рассмотрим вкратце сделанные при их выводе приближения. Отметим, прежде всего, что функция (77) не удовлетворяет соотношениям ортогональности

$$\begin{aligned} & \int \{ \Psi - F_n(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2) \} \psi_n^*(\vec{r}_2) d\tau_2 = 0 \\ & \int \{ \Psi - G_n(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_1) \} \psi_n^*(\vec{r}_1) d\tau_1 = 0. \quad (83) \end{aligned}$$

Вследствие этого в интегралах (81) и (82) играют существенную роль члены, содержащие энергию взаимодействия, что не имело бы места, если бы соотношения (83) удовлетворялись. Для достаточно быстрых столкновений эта погрешность будет малой; однако для электронов с энергиями, близкими к энергии возбуждения, ошибка может оказаться достаточно большой. Это обстоятельство было рассмотрено нами в главе X в связи с упругими столкновениями; преодоление его является затруднительным.

Отметим, что применение соотношения (82) встречает трудности в виду неопределенности величины третьего члена, которым мы пренебрегли. Преобразовав ур-ние (79) в интегральное уравнение, мы видим, что этот член характеризует вероятность электронного обмена, имеющего место после первоначального неупругого рассеяния, при-

водящего к образованию волны $F_n(\vec{r}_2) \pm G_n(\vec{r}_2)$. Влияние этого члена может оказаться незначительным, хотя это положение ни в коей степени нельзя считать доказанным.

Заметим, наконец, что мы предполагали, что все недиагональные матричные элементы малы и пренебрегли тем самым обратным воздействием волн F_n и G_n на падающую и упруго рассеянную волну P_0 . Это соответствует слабой связи между обеими группами волн; однако в действительности в некоторых случаях может оказаться необходимым предположить наличие „тесной связи“, соответствующей большому значению недиагонального матричного элемента V_{0n} . В дальнейшем будет показано, что экспериментальные данные свидетельствуют о необходимости учета подобных эффектов.

Приближение, в котором мы пренебрегаем всеми недиагональными матричными элементами, за исключением V_{0n} , не учитывает также влияния остальных неупруго рассеянных волн на переход $0 \rightarrow n$. Эти приближения отличны от сделанных выше, так как они введены не на основании соображений об электронном обмене, а связаны с методом искаженных волн (§ 3. 1 глава VIII).

§ 5. 2. Численные расчеты для гелия и сравнение с опытными данными. Эффективные сечения синглетного и триплетного возбуждения атомов гелия были впервые определены Мессе и Мором¹⁾ с помощью приближенных формул (81) как функции от скорости возбуждающего электрона. Эти вычисления были затем обобщены для различных скоростей и различных возбужденных состояний.

Теория в основных чертах воспроизводит экспериментальные данные. С помощью формулы (81) можно показать, что вероятность возбуждения триплетных состояний S , P и D убывает соответственно как v^{-4} , v^{-6} и v^{-8} в противоположность вероятностям возбуждения синглетных состояний, которые изменяются как v^{-2} , $v^{-2} \lg \alpha v$ и v^{-2} (v — скорость падающего электрона).

Для случая состояний $1S$ и $3S$ между теоретическими и экспериментальными данными наблюдается полное согласие при всех скоростях

¹⁾ Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc., A, 132, 605, 1931; 140, 613, 1933.

столкновений; для состояний $1P$ и $1D$ это согласие становится, однако, неудовлетворительным в случае электронов с энергией, меньшей 100 и 75 вольт (см. рис. 40). Из рис. 40 следует, что при уменьшении энергии электронов до 100 вольт вычисленные вероятности возбуждения уровней P начинают значительно превышать наблюдаемые величины. Для уровней $1D$ это явление наблюдается только при малых значениях скоростей, для состояний S больших расхождений между теоретическими и экспериментальными данными ни при каких значениях скорости, по видимому, не существует.

В § 3. 2 и § 3. 3 этой главы мы показали, что эти же черты свойственны вероятности ионизации и вероятности возбуждения рентгеновых лучей; формула Борна для вычисления вероятностей переходов, связанных с оптически разрешенными уровнями, по видимому не справедлива.

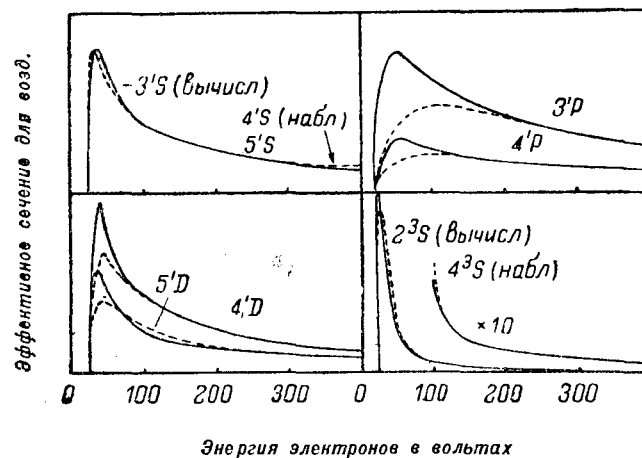


Рис. 40. — вычислено, наблюдалось. Шкала выбрана так, что точки совпадают при 200 вольтах.

Исследуя сделанные нами приближения, мы видим, что неудовлетворительность теории во всех случаях связана с нашим предположением о малости V_{0n} . Действительно, при возбуждении оптически разрешенных уровней V_{0n} обращается в нуль как r^{-2} ; такое поле обладает большой рассеивающей способностью (упругое сечение для такого поля равно бесконечности, см. § 3 главы II). Для исправления теории следовало бы решить систему уравнений, приведенную нами в § 3. 2 главы VIII. Мы показали (см. рис. 11 главы VIII и § 3. 31 главы XIII), что точное решение этих уравнений привело бы к меньшему значению вероятности возбуждения, нежели это следует из теории Борна — в полном согласии с приведенными выше экспериментальными данными. Для D -уровней при больших r V_{0n} обращается в нуль как r^{-4} ; такое поле обладает меньшей рассеивающей способностью, нежели поле, соответствующее возбуждению P -уровней. Можно ожидать, таким образом, что в случае возбуждения D -уровней приближение Борна будет находиться в согласии с опытными данными для значительно меньших скоростей, тогда как

для возбуждения S -уровней, при котором V_{0n} обращается в нуль как $e^{-\lambda r}$, следует ожидать лишь очень небольшого отклонения от обычной теории. Эти соображения находятся в согласии с опытными данными.

Вычисленные относительные значения вероятностей возбуждений триплетов и синглетов для электронов, энергия которых превышает 100 В, находятся в приближенном согласии с опытными данными; однако наблюдаемые кривые возбуждения уровней 3P с увеличением скорости спадают значительно медленнее, нежели вычисленные кривые. Причина этого расхождения не ясна; по всей вероятности оно обусловлено побочными процессами, имеющими место в экспериментальных условиях.

Пользуясь формулой (82), вышеупомянутые авторы ¹⁾, рассмотрели также вопрос о возбуждении уровней 2^1P и 2^3P . Волновая функция \mathfrak{F}_n была вычислена Макдугаллом ²⁾; вычисление выражения (82) было осуществлено методами численного интегрирования. Это вычисление интересно тем, что оно учитывает возмущение падающей и выходящей волн полем атома и учитывает, таким образом, диффракционные эффекты. Для электронов с энергией 50 вольт получается угловое распределение, совпадающее по форме с наблюдаемым Мором и Николлем; при больших значениях углов рассеяния это распределение становится почти равномерным; при 90° оно имеет, однако, слабый максимум.

§ 5. 3. Возбуждение тяжелых атомов. С помощью формулы (81) Пенни ³⁾ были произведены вычисления, относящиеся к случаю возбуждения $2P$ -уровней ртути. Наиболее интересной чертой его расчетов является применение атомных волновых функций, содержащих члены, связанные с взаимодействием спинового и орбитального движений. Последнее является весьма существенным для столь тяжелого атома, как ртуть. В силу его наличия, волновые функции триплетного состояния 2^3P_1 не являются вполне антисимметричными по отношению к орбитальным волновым функциям; это состояние может быть, таким образом, возбуждено без участия электронного обмена. Возбуждение этого уровня происходит поэтому и при больших скоростях электронов. Вычисленное отношение интенсивностей различных уровней хорошо согласуется с опытными данными даже при очень низких энергиях возбуждения (10 вольт). Форма кривых зависимости возбуждения от скорости также хорошо согласуется с наблюдениями.

Рассмотрим теперь диффракционные эффекты, наблюдаемые Мором и Николлем при неупругом рассеянии электронов. Если мы пренебрежем обменными эффектами (что допустимо при средних и больших скоростях столкновений), интенсивность рассеяния электронов, возбуждивших n -ое состояние данного атома, отнесенная к единице телесного угла, определится выражением:

$$I_n(\theta) = \frac{k_n}{k} \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \left| \int V_{0n}(\vec{r}') F_0(r', \theta') \mathfrak{F}_n(r', \pi - \theta) d\tau' \right|^2, \quad (84)$$

где

$$V_{0n}(\vec{r}) = \int V(\vec{r}, \vec{r}_a) \psi_0(\vec{r}_a) \psi_n^*(\vec{r}_a) d\tau_a,$$

причем индекс a относится к координатам атомных электронов. Функции $F_0(r, \theta)$ и $F_n(r, \theta)$ могут быть представлены в следующем виде:

$$F_0(r, \theta) = e^{ikr \cos \theta} + \sum_s \left[F_0^s - \sqrt{\frac{2\pi}{kr}} J_{s+\frac{1}{2}}(kr) \right] (2s+1) i^s P_s(\cos \theta), \quad (85)$$

$$\mathfrak{F}_n(r, \pi - \theta) = e^{-ik_n r \cos \theta} + \sum_s \left[\mathfrak{F}_n^s - \sqrt{\left(\frac{2\pi}{k_n r}\right)} J_{s+\frac{1}{2}}(k_n r) \right] (2s+1) i^{-s} P_s(\cos \theta), \quad (86)$$

где первый член характеризует плоскую волну, не возмущенную атомным полем, а ряд характеризует возмущение этой волны полями нормального и возбужденного атомов. Подставив эти выражения в формулу (84), найдем:

$$I_n(\theta) = \frac{k_n}{k} \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \left| \int V_{0n} \exp \{i(kr' \cos \theta' - k_n r' \cos \theta)\} d\tau' + \sum_s P_s(\cos \theta) \int V_{0n} H_s(r', \theta', \varphi') d\tau' \right|^2, \quad (87)$$

где H_s — некоторая функция от r', θ' и φ' . Первый член этого интеграла в точности совпадает с первым членом формулы Борна; его физический смысл был рассмотрен нами в § 2 этой главы. При углах рассеяния, превышающих 30° , он ничтожно мал, и основную роль играют члены ряда. Диффракционные эффекты при углах, превышающих 30° , определяются, таким образом, числом гармонических составляющих этого ряда, заметно отличных от нуля. Если энергия падающего электрона велика по сравнению с энергией возбуждения, то $k_n \approx k$ и, следовательно, поля нормального и возбужденного атомов эквивалентны. В этом случае в рядах (85) и (86) может быть взято одно и то же число членов, причем относительная роль их будет такой же, как и в случае упругого рассеяния, описываемого функцией $F_0(r, \theta)$. При больших значениях углов диффракционные эффекты будут, таким образом, весьма сходны с эффектами, наблюдаемыми при упругом рассеянии. Это обстоятельство находится в согласии с опытными данными.

При малых скоростях это сходство исчезает, так как поле V_{nn} обладает значительно большей протяженностью, нежели поле V_{00} , чем обуславливается необходимостью учета большего числа членов в F_n , нежели в F_0 . При малых скоростях различие между k_n и k становится, таким образом, существенным. Именно этот результат и был получен при исследовании возбуждения атомов ртути (см. рис. 39, из которого

¹⁾ Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A. **139**, 187, 1932.

²⁾ Macdougall, Proc. Camb. Phil. Soc., **28**, 341, 1932.

³⁾ Penney, Phys. Rev., **39**, 467, 1932.

следует, что угловое распределение неупруго рассеянных электронов при энергиях, превышающих 55 вольт, сходно с угловым распределением упруго рассеянных электронов; по мере уменьшения энергии это сходство, однако, исчезает).

Эта теория была применена Месси и Мором¹⁾ к вопросу о неупругом рассеянии электронов в неоне и аргоне. Наиболее вероятное

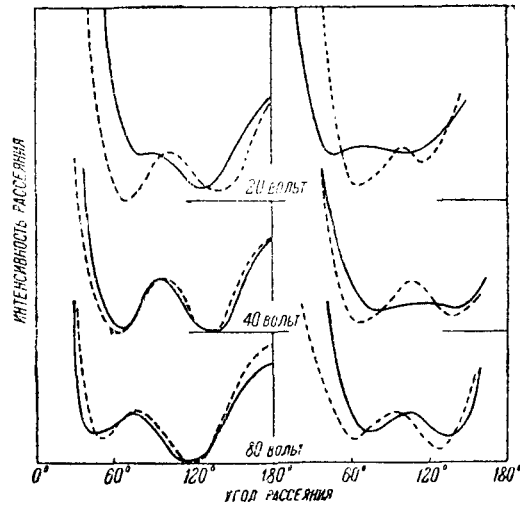


Рис. 41.

возбуждение связано с переходом $P-S$, потенциал которого V_{0n} (r') имеет следующий вид:

$$V_{0n}(r') \begin{cases} \cos \theta' \\ 2 - \frac{1}{2} \sin \theta' e^{\pm i\Phi} \end{cases}$$

и

$$I_n(\theta) = \frac{k_n}{k} \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \{ |f_c(k, k_n, \theta)|^2 + 2 |f_s(k, k_n, \theta)|^2 \},$$

где первый член соответствует потенциалу, содержащему $\cos \theta'$, а второй — потенциалу, содержащему $\sin \theta' e^{\pm i\Phi}$. Функции f_c и f_s могут быть представлены в виде бесконечных рядов шаровых функций:

$$f_c = \sum_s a_s \{ \gamma_s, \gamma_{s+1}, \gamma_{s-1}, A(k \pm k_n), B(k \pm k_n) \} P_s(\cos \theta)$$

$$f_s = \sum_s b_s \{ \gamma_s, \gamma_{s+1}, \gamma_{s-1}, A(k \pm k_n), (k \pm k_n) \} P'_s(\cos \theta),$$

¹⁾ Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A, 146, 880, 1934

если только Θ не слишком мало. Фазы η_s и γ_s — те же, что и для упругого рассеяния, обусловленного соответственно потенциалами V_{∞} и V_{nn} , а

$$A(\lambda) = \int_0^{\infty} V_{0n}(r) \sin \lambda r dr; \quad B(\lambda) = \int_0^{\infty} V_{0n}(r) \cos \lambda r dr.$$

Для определения потенциалов V_{00} , V_{nn} и V_{0n} вышеупомянутые авторы воспользовались волновыми функциями, полученными с помощью правил Слейтера¹⁾, а фазы η_s и γ_s были вычислены с помощью приближенного метода Джеффри, описанного нами в § 6 главы X.

Результаты вычислений для аргона приведены на рис. 41. Хотя согласие между теорией и экспериментом ни в коей степени не может считаться превосходным, мы увидим в дальнейшем, что при больших углах рассеяния теория несомненно предсказывает одинаковую форму как упругого, так и неупругого угловых распределений, объясняя тем самым эту характерную черту опытных данных. Аналогичные результаты получены также для неона, при чем согласие с опытом в этом случае даже лучше, чем в предыдущем (стр. 228).

§ 6. Заключительные замечания и физический смысл теории рассеяния медленных электронов

Результаты соображений, изложенных в главах IX и XI, могут быть сформулированы с помощью таблицы VII (стр. 288).

Имея ее перед собой, выясним — обладают ли эти результаты каким-либо физическим смыслом. Физическая природа процессов может быть выявлена в том случае, если мы будем тщательно различать эффекты, обуславливаемые диагональными элементами V_{nn} матрицы атомного потенциала и ее недиагональными элементами V_{nm} . Первые связаны с дифракционными эффектами и не имеют отношения к обмену энергии, тогда как вторые оказывают слабое влияние на рассеяние при больших углах, но почти полностью определяют вероятность переходов. При рассмотрении быстрых столкновений эти эффекты разделены друг от друга и мы имеем, с одной стороны, рассеяние при больших углах и дифракционные эффекты, наблюдаемые при упругих столкновениях, а с другой — неупругое рассеяние, сопровождающееся изменением длины волны. При рассмотрении медленных столкновений мы должны, однако, принимать во внимание „двойные“ столкновения, при которых электрон может быть рассматриваем как находящийся под влиянием двух или большего числа средних атомных потенциалов. Электрон может, таким образом, испытать сперва неупругое столкновение, при котором возбуждается n -тое состояние атома, но остаться практически неотклоненным. Благодаря своей малой скорости, он может затем оставаться вблизи атома столь долго, что произойдет второе „сверхупругое“ столкновение, после которого электрон

¹⁾ Slater, Phys. Rev. 36, 57, 1930.

Таблица VII

Рассматриваемый процесс	Влияние на	
	упругое рассеяние	неупругое рассеяние
1. Рассеяние возмущенным атомным полем, при котором падающая волна лишь слегка искажена.	Малая интенсивность рассеяния. Угловое распределение изменяется монотонно с изменением интенсивности, убывая при возрастании угла.	Монотонное угловое распределение, с возрастанием угла убывает быстрее, нежели в случае упругого рассеяния.
2. Искажение падающей и рассеянной волн атомным полем.	Максимумы и минимумы на кривых зависимости эффективного сечения от скорости (эффект Рамзауэра-Тоулсенда). Максимумы и минимумы в угловых распределениях, наиболее заметные в случае тяжелых атомов и исчезающие при малых скоростях столкновений.	Не оказывает заметного влияния на кривые зависимости эффективного сечения от скорости. Максимумы и минимумы в угловых распределениях при больших значениях углов, весьма сходные с соответствующими угловыми распределениями для упругого рассеяния, за исключением случая очень малых скоростей столкновений.
3. Электронный обмен.	При малых скоростях столкновений приводит к большому разнообразию формы угловых распределений в случае легких атомов (H, He)	Приводит к возможности возбуждения оптически запрещенных переходов (т. е. возбуждения триплетов He). Характер влияния на угловое распределение пока еще не выяснен.
4. Искажение атомного поля (поляризация) или же взаимодействие рассеянных волн друг с другом.	Резкое возрастание рассеяния при малых значениях углов. Увеличение общей вероятности упругого столкновения.	Уменьшение вероятности неупругого столкновения. Характер влияния на угловое распределение еще не выяснен.

ния таких столкновений ниже значения, даваемого приближением Борна.

Результаты, перечисленные в таблице VII под № 4, можно, таким образом, рассматривать, как обусловленные наличием двойных неупругих столкновений электрона с отдельным атомом.

Для объяснения эффектов диффракции неупруго рассеянных электронов мы должны лишь принять во внимание возможность медленных электронов находиться последовательно под воздействием потенциалов V_{00} и V_{0n} или же V_{0n} и V_{nn} . В первом случае электрон диффрагируется полем V_{00} и диффрагированный пучок остается затем вблизи атома достаточно долгое время, чтобы возбудить n -ое атомное состояние. Этот вторичный процесс не оказывает заметного влияния на угловое распределение, сохраняющее форму, отвечающую упругому рассеянию, но наблюдаемый электрон испытывает при этом потерю энергии. Аналогично, во втором случае наблюдаемые электроны обладают угловым распределением, соответствующим диффракции полем V_{nn} . Если это распределение сходно с распределением, отвечающим диффракции полем V_{00} , так что заметной интерференции между ними не происходит, то при неупругом рассеянии наблюдаются диффракционные эффекты.

Мы приходим, таким образом, к описанию наблюдаемых при медленных столкновениях электронов, как явлений „двойного“ столкновения электрона с одним и тем же атомом.

будет обладать своей первоначальной энергией и останется почти неотклоненным.

Такой электрон во всех опытах будет рассматриваться как упруго рассеянный; при возрастании роли этого эффекта будет наблюдаться заметное увеличение упругого рассеяния при малых значениях углов. Этот процесс приведет также к уменьшению интенсивности неупругого рассеяния, наблюдающемуся при уменьшении эффективного сече-

молекулы с достаточной степенью точности может быть представлено как сумма двух полей, сферически симметричных относительно соответствующих ядер; им были получены также численные данные для молекул азота и фтора.

С помощью таких приближенных полей и приближенного метода Борна легко могут быть получены формулы для рассеяния. При попытке получения более точных формул рассеяния путем обобщения метода Факсена и Хольстмарка (глава II) мы встречаемся со следующей трудностью: в волновом уравнении движения электрона в поле молекулы переменные не разделяются, как и в случае атомных полей; для нахождения решения приходится поэтому пользоваться лишь весьма упрощенной формой поля, как это будет показано в § 5.

Рассмотрим прежде всего применение приближения Борна.

§ 2. Рассеяние аксиально симметричным полем ¹⁾

В § 1 главы VII было показано, что в случае применимости формулы Борна рассеяние сферически симметричным полем является функцией только от $v \sin \frac{\theta}{2}$, где v — скорость падающего электрона, а θ — угол рассеяния. Можно показать, что рассеяние несколькими сходными независимыми друг от друга аксиально симметричными полями также будет зависеть только от $v \sin \frac{\theta}{2}$, при условии, что направления осей этих полей распределены беспорядочным образом (подобно случаю газовых молекул).

Если потенциал такого поля определяется выражением

$$V(r, \theta, \varphi) = \sum_n V_n(r) P_n(\cos u),$$

где u измеряется по отношению к оси симметрии, то дифференциальное сечение для рассеяния таким полем, усредненное по всем направлениям этой оси, имеет следующий вид:

$$I(\theta) d\omega = \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \sum_0^\infty \left\{ F_n \left(v \sin \frac{\theta}{2} \right) \right\}^2 d\omega,$$

где

$$F_n \left(v \sin \frac{\theta}{2} \right) = \frac{2\pi}{2n+1} \left(\frac{\pi}{k \sin \frac{\theta}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty V_n(r) J_{n+\frac{1}{2}} \left(2kr \sin \frac{\theta}{2} \right) r^{\frac{3}{2}} dr,$$

причем $k = 2\pi mv/h$.

ГЛАВА XII

СТОЛКНОВЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С МОЛЕКУЛАМИ

§ 1. Рассматриваемые в этой главе явления могут быть классифицированы следующим образом:

1. Диффракционные эффекты, обусловленные наличием двух или большего числа ядер. Эти эффекты аналогичны случаю оптической диффракции от нескольких щелей.

2. Диссоциация при столкновении. Применение квантовой механики к исследованию молекул показало, что при данном расстоянии между ядрами существует ряд электронных состояний, при которых молекула не является устойчивой. Переход из устойчивого состояния в состояние неустойчивое приводит к диссоциации молекулы. Устойчивое и неустойчивое состояния во многих случаях относятся к двум некомбинирующим системам термов; тем не менее, наличие электронного обмена при столкновении делает возможной диссоциацию молекулы. Диссоциация молекулы при столкновении без электронного обмена также может иметь место, сопровождая обычное возбуждение или ионизацию.

3. Возбуждение внутримолекулярного движения. Для падающих электронов, энергия которых сравнима с колебательной или вращательной энергией ядер, имеется возможность обмена энергии с последними.

Рассмотрим теперь эти явления с теоретической точки зрения. Ясно, прежде всего, что теория рассеяния электронов молекулами должна быть значительно более сложной, нежели теория рассеяния электронов атомами. Молекулярное поле не обладает сферической симметрией, и при столкновениях с медленными электронами внутримолекулярными движениями пренебречь нельзя.

Для решения поставленной нами задачи необходимо найти функции, характеризующие молекулярное поле; метод самосогласованного поля до сих пор к этому случаю применен не был. Для случая молекулы водорода приближенные волновые функции были получены Вангом ¹⁾ и Розеном ²⁾ с помощью вариационного метода. Поле этой молекулы известно, таким образом, с достаточной степенью точности. Для какой-либо другой молекулы этот метод является чересчур сложным; Хунд ³⁾ заменил его статистическим методом Томаса — Ферми. Он нашел при этом, что молекулярное поле симметричной двухатомной

¹⁾ Wang, Phys. Rev., 31, 579, 1928.

²⁾ Rosen, там же, 38, 2099, 1931.

³⁾ Hund, Zs. f. Phys., 77, 12, 1932.

¹⁾ Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A., 136, 258, 1932.

Мы можем найти соотношение между рассеянием рентгеновых лучей и рассеянием электронов, аналогичное соотношению, полученному нами для случая атомов (см. гл. VII, § 1). Для двухатомных молекул с одинаковыми ядрами мы имеем (это выражение не усреднено по ориентациям):

$$I(\theta) d\omega = \frac{e^4}{2m^2 v^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \left| 2Z \cos \left\{ \frac{\pi}{\lambda} (\vec{n}_0 - \vec{n}_1) \cdot \vec{d} \right\} - F \right|^2 d\omega,$$

где \vec{d} — расстояние между ядрами, Z — заряд ядра, F — рентгеновский структурный фактор молекулы, λ — длина рассеянных волн, а \vec{n}_0 и \vec{n}_1 — единичные векторы в направлении падающей и рассеянной волн.

§ 3. Упругое рассеяние в молекулярном водороде

В § 1 было указано, что только для простейшей молекулы H_2 можно получить приближенную аналитическую формулу для потенциала $V(r, \theta)$.

Если $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ — волновая функция нормального состояния молекулы, мы получаем:

$$V(r, \theta) = e^2 \int \int \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{p} - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} \right) \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_0^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (1)$$

где расстояния от ядер обозначены через r и p , а электроны характеризуются индексами 1 и 2. Для $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ мы можем воспользоваться функцией, полученной Вангом с помощью вариационного метода:

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = Z^3 \left[\frac{1}{2\pi} \left\{ 1 + e^{-2Zd} \left(1 + Zd + \frac{1}{3} Z^2 d^2 \right)^2 \right\} \right]^{\frac{1}{2}} [e^{-Z(r_1 + p_2)} + e^{-Z(r_2 + p_1)}], \quad (2)$$

где $Z = 1,166/a_0$, а d — расстояние между ядрами в положении равновесия, равняющееся приближенно $\frac{3}{2} a_0$.

Подставив выражение (2) для $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ в выражение (1), мы можем определить дифференциальное упругое сечение $I(\theta) d\omega$ для молекул водорода, (при условии справедливости формулы Борна). Впервые это вычисление было осуществлено Мессе¹⁾ для некоторых зна-

¹⁾ Massey, Proc. Roy. Soc., A, 129, 616, 1930.

чений скоростей и углов рассеяния и было затем обобщено Мессе и Мором¹⁾ для всей области значений $v \sin \frac{\theta}{2}$. Окончательная формула для дифференциального сечения, усредненного по всем ориентациям оси молекулы, имеет следующий вид:

$$(1 + \sin x/x) [I_1 + I_2] + \text{чл. более высокого порядка,}$$

где

$$I_1 = \pi^2 Z^{-3} \left(2Z^2 + k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \left(Z^2 + k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^{-2},$$

$$I_2 = \frac{\pi^2 S}{Z^3 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

$$- \left(\frac{4\pi}{k \sin \frac{\theta}{2}} \right)^{\frac{5}{2}} \int_0^\infty e^{-Zr} f_0(r, d) J_{\frac{1}{2}} \left(2kr \sin \frac{\theta}{2} \right) r^{\frac{3}{2}} dr. \quad (3)$$

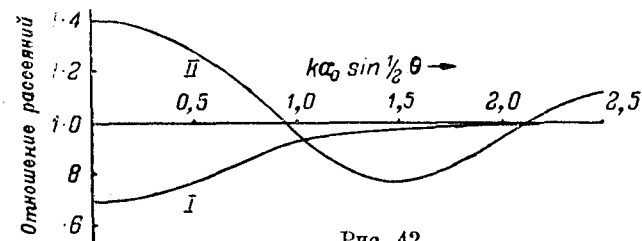


Рис. 42.

I — без диффракционного множителя $1 + \sin x/x$; II — с диффракционным множителем $1 + \sin x/x$.

В этих формулах

$$S = e^{-Zd} \left(1 + Zd + \frac{1}{3} Z^2 d^2 \right)$$

$$f_0(r, d) = e^{-Zd} (Z^2 r d)^{-1} \{ (1 + Zd) \sinh Zr - Zr \cosh Zr \} (r < d) \\ = e^{-Zr} (Z^2 r d)^{-1} \{ (1 + Zr) \sinh Zd - Zd \cosh Zd \} (r > d)$$

Интересно выяснить относительное значение отдельных членов этих выражений. I_1 характеризует рассеяние обоими атомами, рассмотренными в отдельности, но взятыми с эффективным зарядом ядра 1,166; I_2 характеризует влияние молекулярной связи на распределение концентрации заряда между ядрами; множитель $1 + \frac{\sin x}{x}$ — диффракционный фактор, обусловленный наличием двух рассеивающих центров.

¹⁾ Massey and Mohr, там же 135, 258, 1932.

На рис. 42 иллюстрируется относительная роль этих членов, для чего рассеяние молекулой водорода сравнивается с рассеянием двумя отдельными атомами водорода при различных значениях $v \sin \frac{\theta}{2}$. Не входя в рассмотрение диффракционного множителя мы видим, что при малых значениях $v \sin \frac{\theta}{2}$ рассеяние молекулой меньше, нежели рассеяние отдельными атомами. Это обусловлено наличием молекулярной связи, создающей повышенную концентрацию заряда между обоими атомами и уменьшающей таким образом эффективную величину сечения. При введении в рассмотрение диффракционного множителя это отношение колеблется

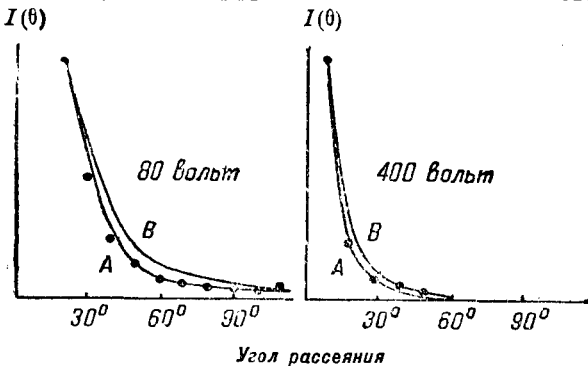


Рис. 43. Точки — экспериментальные данные. А — вычисленные кривые для H_2 . В — вычисленные кривые для H . Кривые проведены так, что при минимальном угле рассеяния они проходят через экспериментальные точки.

медленных электронов в молекулярном водороде не находятся в согласии с формулой Борна. Предполагая, что молекулярная связь играет очень малую роль, мы можем объяснить это расхождение при помощи более высоких приближений пользуясь изложенной в § 9 главы X теорией. При больших значениях скорости измерения Арно¹⁾ (для электронов с энергией 80, 200 и 400 В) дают хорошее согласие с формулой (3). Это показано на рис. 43, где приведены также кривые для случая атомного водорода. Выбор между теоретическими кривыми для атомов и молекул является затруднительным; опытные данные свидетельствуют, как будто, в пользу последних.

§ 4. Рассеяние сложными молекулами

На основании опытов с молекулярным водородом нельзя, конечно, сделать каких-либо заключений относительно диффракционных эффектов, имеющих место при наличии двух центров, в виду очень быстрого убывания интенсивности рассеяния с возрастанием угла; для

около среднего значения, равного единице. Если не принимать во внимание диффракционного множителя, рассеяние очень хорошо может быть представлено как обусловленное двумя атомами с эффективными зарядами ядер 1,166.

Сравним теперь формулу (3) с опытными данными. В § 3.2 главы IX было показано, что наблюдаемые угловые распределения

более тяжелых молекул эти эффекты легко могут быть, однако, наблюдаемы в действительности.

Основной чертой вычислений для молекулярного водорода являлось предположение о малом влиянии молекулярной связи. Для быстрых электронов это влияние является незначительным, за исключением случая очень малых углов. Для исследования степени общности этого результата вычисления могут быть распространены на случай рассеяния в азоте. Хунд показал, что потенциал молекулярного поля приблизительно определяется следующим выражением:

$$V(r, \theta, \varphi) = 2z Z d^{-1} \{v(r) + v(p)\}, \quad (4)$$

где Z — заряд ядра, d — расстояние между ядрами, а r и p — расстояния падающего электрона от обоих ядер. Функции $v(r)$ и $v(p)$ являются сферически симметричными по отношению к соответствующим ядрам. Интенсивность рассеяния, усредненная по всем ориентациям оси молекулы, определяется поэтому следующим выражением:

$$I(\theta) = \frac{32\pi^4 m^2 e^4 Z^2}{k^2 d^2 h^4 \sin^2 \theta/2} \left(1 + \frac{\sin x}{x}\right) \left\{ \int v(r) \sin\left(2kr \sin \frac{\theta}{2}\right) dr \right\}^2. \quad (5)$$

Воспользовавшись таблицей значений $v(r)$, приведенной Хундом, мы можем подсчитать $I(\theta)$. Результаты вычислений показывают, что влияние молекулярной связи очень мало и в первом приближении им можно пренебречь.

Весьма возможно, что этот результат может быть применен ко всем молекулам. Для двухатомных молекул с одинаковыми ядрами дифференциальное сечение для рассеяния быстрых электронов может быть представлено в следующем виде:

$$I(\theta) = 2I_a(\theta) [1 + \sin x/x], \quad (6)$$

где I_a — сечение для отдельного атома, а $x = 4\pi d \sin \frac{\theta}{2} / \lambda$.

Эта формула может быть обобщена для случая многоатомных молекул с помощью формулы Дебая, характеризующей рассеяние рентгеновых лучей системой рассеивающих центров. Для молекулы с n атомами интенсивность рассеяния определяется формулой

$$I(\theta) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n J_i J_j^* \frac{\sin x_{ij}}{x_{ij}}, \quad (7)$$

где $x_{ij} = 4\pi l_{ij} \sin \frac{\theta}{2} / \lambda$. Здесь l_{ij} — расстояние между ядрами i и j ; J_i — амплитуда волны, которая была бы рассеяна одним лишь атомом i (т. е. $|J_i|^2 d\omega$ — дифференциальное сечение, соответствующее i -ому атому).

Амплитуды J_i легко могут быть вычислены с помощью метода Хартри или Томаса — Ферми и формулы Борна, как это показано в § 4

¹⁾ Arnot, Proc. Roy. Soc. A, 133, 615, 1931.

главы IX. В качестве иллюстрации получаемого при этом углового распределения на рис. 44 приведены вычисленные для Br_2 и SnCl_4 значения $I(\theta)$, как функции от $\sin \frac{\theta}{2} / \lambda$. Наличие максимумов и мини-

мумов наиболее заметно в случае более тяжелой молекулы. Положение их зависит от структуры молекулы. Это дает возможность определять структуру данной молекулы с помощью экспериментальных исследований рассеяния электронов в соответственном теле. Подобного рода анализ был проведен Вирлем для большого числа молекул; при этом оказалось возможным получить ответы на многие весьма существенные вопросы органической химии. Так например, было установлено, что молекула бензола имеет плоскую конфигурацию, было получено подтверждение тетраэдрической модели углерода.

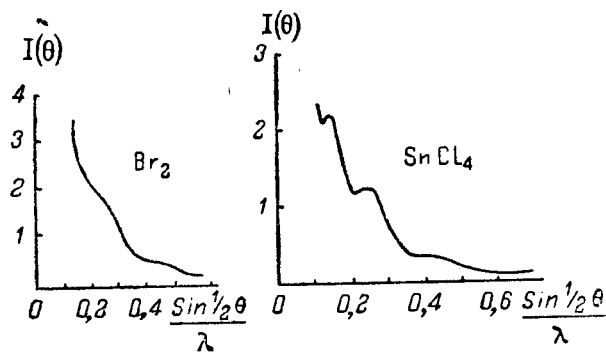


Рис. 44.

С помощью этого метода могут быть исследованы также и более сложные молекулы, можно определять при этом характер связи между различными атомами, измеряя расстояние между ними. Найдено, например, что существует определенное расстояние между двумя атомами углерода, отвечающее простой связи, некоторое другое определенное расстояние для двойной связи и т. д. Для получения более подробных сведений по этому вопросу мы отсылаем читателя к оригинальным работам.

§ 5. Применение метода Факсена и Хольстмарка

Как это было указано в § 1, обобщенный метод Факсена и Хольстмарка может быть применен к рассмотрению рассеяния электронов молекулярным полем только при весьма упрощенной форме последнего. Вопрос о вычислении рассеяния медленных электронов достаточно интенсивными молекулярными полями был подробно рассмотрен Стиром¹⁾.

С помощью эллиптических координат ρ , μ и φ , где:

$$\rho = (r + p) / d, \quad \mu = (r - p) / d \quad (8)$$

можно показать, что в волновом уравнении для упругого рассеяния переменные разделяются, если потенциальная энергия имеет вид:

$$V(\rho, \mu) = -2Z\varepsilon^2 d^{-1} \rho f(\rho) / (\rho^2 - \mu^2). \quad (9)$$

¹⁾ Stier, Zs. f. Phys., 76, 439, 1932.

По аналогии с методом Эллиса и Морзе для рассеяния атомами, Стир выбрал для молекулярного поля выражение (9) при $\rho \leq \rho_0$, и $V=0$ при $\rho > \rho_0$, где ρ_0 — постоянная. Он положил, далее

$$f(\rho) = (\rho_0 - \rho)^2 / (\rho_0 - 1)^2. \quad (10)$$

Даже при таком выборе потенциалов вычисление является чрезвычайно сложным, в частности потому, что в очень небольшом числе работ, посвященных вопросам рассеяния, применяются такого рода координаты. Дифференциальное сечение, соответствующее определенному направлению оси, может быть представлено в следующем виде:

$$I(\alpha, \beta, \varphi) = \frac{1}{k^2} \sum_{l, l'} (-1)^{l+l'} \sum_{m, m'=0}^{l, l'} G_l^m(\alpha) G_{l'}^{m'}(\alpha) \sin \eta_l^m \times$$

$\times \sin \eta_{l'}^{m'} \cos(\eta_l^m - \eta_{l'}^{m'}) \Pi_l^m(\cos \beta) \cos m\varphi \times \Pi_{l'}^{m'}(\cos \beta) \cos m'\varphi, \quad (11)$
где α — угол падения, β — угол рассеяния, взятый по отношению к оси молекулы, а η_l^m — фазовые параметры, зависящие от V, k, l и m . Функции $\Pi_l^m(\cos \beta)$ могут быть разложены в ряды по шаровым функциям. Для нахождения зависимости между вычисленными и наблюдаемыми значениями необходимо усреднить выражение (11) по всем ориентациям оси молекулы. При этом интенсивность рассеяния определяется выражением

$$I(\theta) = \frac{1}{k^2} \sum_{l, l'} (-1)^{l+l'} \sum_{m, m'=0}^{l, l'} R_{ll'}^{mm'}(\theta) \sin \eta_l^{m'} \sin \eta_{l'}^{m'} \cos(\eta_l^m - \eta_{l'}^{m'}), \quad (12)$$

где $R_{ll'}^{mm'}(\theta)$ — сложная функция от угла рассеяния, выраженная Стиром с помощью зональных шаровых функций. Эта формула может быть сравнена с формулой (17) главы II. Существенное различие между ними состоит в том, что $R_{ll'}^{mm'}(\theta)$ не равняется произведению двух шаровых функций, а представляет собою сумму нескольких таких функций.

При вычислении Стир разлагает функции по степеням ε , где

$$\varepsilon = (\pi d / \lambda)^2.$$

Его формула для $R_{ll'}^{mm'}(\theta)$ применима только при малом ε . В нулевом приближении (ε обращается в нуль) полное сечение имеет следующий вид:

$$Q = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_l \sum_m (2 - \delta_{0m}) \sin^2 \eta_{lm}. \quad (13)$$

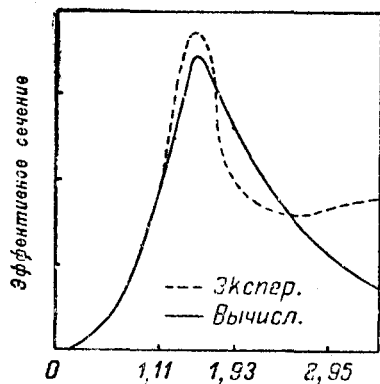
Сравнивая это выражение с соответствующим выражением для рассеяния атомами [см. уравнение (18) главы II], мы видим, что единственная разница между ними заключается в том, что фазы различны для различных значений m .

Численное применение этой формулы к рассеянию электронов с энергией меньше 10 V в азоте привело к следующим результатам. При

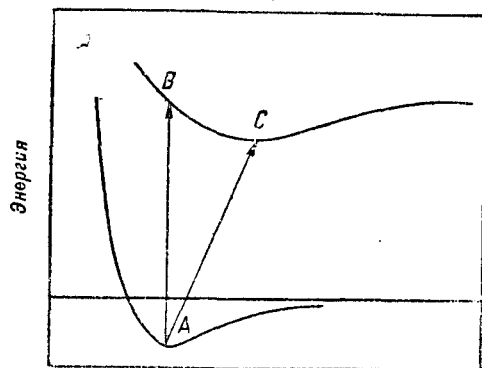
$Z=4,08$ и $\rho_0=3,46$ формулы (12) и (13) дают очень хорошее согласие с опытными данными (рис. 45). Это свидетельствует о том, что анализ результатов, полученных для рассеяния медленных электронов молекулами, может привести к получению новых данных о природе молекулярных полей.

§ 6. Неупругие столкновения с молекулами. Возбуждение электронных уровней. Принцип Франка-Кондона

При рассмотрении электронных состояний молекулы в первом приближении ядра можно считать покоящимися; любому значению расстояния между ядрами соответствует некоторое стационарное состояние



Скорость электронов в \sqrt{v}
Рис. 45.



Расстояние между ядрами
Рис. 46.

системы электронов. Согласно принципу Франка-Кондона при переходе от одного электронного состояния в другое расстояние между ядрами остается неизменным. Убедительное экспериментальное доказательство справедливости этого принципа было получено в результате измерения критических потенциалов молекул. При этом было найдено, что возбуждение отдельного молекулярного уровня имеет место лишь при определенной скорости падающих электронов, соответствующей энергии, необходимой для приведения молекулы в возбужденное электронное состояние, причем расстояние между ядрами остается таким же, как в случае нормального состояния. Так, например, на рис. 46, где приведены кривые потенциальной энергии для двух электронных состояний, для возбуждения верхнего состояния требуется энергия, соответствующая AB , а не AC .

С точки зрения классической теории в виду большой массы ядра следовало ожидать именно этих результатов; квантовая теория, как нетрудно видеть, приводит к аналогичным результатам. Обозначая расстояние между ядрами через ρ , совокупность квантовых чисел и

координат электронов через n и \vec{r} , а квантовые числа ядра через ν , находим, что вероятность перехода из состояния (n, ν) в состояние (n', ν') , обусловленного воздействием некоторого возмущения, пропорциональна квадрату модуля интеграла:

$$\iint F(\vec{r}, \rho) \psi_{n\nu}(\vec{r}, \rho) \psi_{n'\nu'}^*(\vec{r}, \rho) d\vec{r} d\rho, \quad (14)$$

где $F(\vec{r}, \rho)$ возмущающая функция, обуславливающая переход, а ψ — волновые функции начального и конечного состояний. Согласно квантовой теории молекул, волновая функция молекулы может быть представлена приближенно, как произведение двух волновых функций, одна из которых — $\varphi_n(\vec{r}, \rho)$ — зависит от координат электронов и от расстояния между ядрами, а другая — $\chi_{n\nu}(\rho)$ — от координат ядер и квантовых чисел электронов.

Функция $\psi_{n\nu}(\vec{r}, \rho)$ может быть, таким образом, записана в следующем виде:

$$\psi_{n\nu}(\vec{r}, \rho) = \varphi_n(\vec{r}, \rho) \chi_{n\nu}(\rho) \quad (15)$$

Подставляя это выражение в интеграл (14), мы можем выполнить интегрирование по координатам электронов; при этом останется интеграл по координатам ядер вида

$$\int G(\rho) \chi_{n\nu}(\rho) \chi_{n'\nu'}^*(\rho) d\rho. \quad (16)$$

Величина этого интеграла определяется размерами области, в которой волновые функции $\chi_{n\nu}$ и $\chi_{n'\nu'}$ налагаются друг на друга. Эти функции, характеризующие колебание ядер, принимают наибольшие значения в той области, где вероятность нахождения соответствующего классического вибратора велика. Вне этой области при $\rho \rightarrow \infty$ они быстро стремятся к нулю. Функции $\chi_{n\nu}$ и $\chi_{n'\nu'}$ будут таким образом накладываться заметным образом только в том случае, когда налагаются соответствующие классические движения, т. е. когда начальное и конечное расстояния между ядрами почти одинаковы. Так как вне области классического движения функции обладают конечными, но малыми значениями, интеграл (16) обладает конечным значением в том случае, когда принцип Франка-Кондона нарушается. Обычно это значение относительно мало; оно может, однако, оказаться достаточно большим, если колебательные функции соответствуют низким квантовым состояниям, так как в этих случаях отклонения квантово-теоретических вероятностей от их классических значений являются наиболее заметными. Во многих случаях принцип Франка-Кондона дает, однако, достаточно точное описание поведения ядер.

§ 7. Диффракция неупруго рассеянных электронов молекулой¹⁾

Если мы примем во внимание принцип Франка-Кондона, то дифференциальное сечение $I_n(\theta)d\omega$, соответствующее возбуждению дан-

¹⁾ Mossey and Mohr, Proc. Roy. Soc., A, 135, 258, 1932.

ного электронного уровня, определится следующим выражением:

$$I_n(\theta) d\omega = A \frac{4\pi^2 m^2}{h^4} \frac{k_n}{k} \left| \int \int V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_0(\vec{r}_2) \psi_n^*(\vec{r}_2) \times \right. \\ \left. \times \exp \{ i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{r}_1 \} d\tau_1 d\tau_2 \right|^2 d\omega, \quad (17)$$

где ψ_0 и ψ_n^* — электронные волновые функции начального и конечного состояний молекулы, причем расстояние между ядрами соответствует начальному состоянию. Оператор A означает усреднение по всем ориентациям оси молекулы; остальные символы имеют свое обычное значение. Рассмотрим теперь возбуждение электрона, принадлежащего к отдельной гомеоплярной связи в двухатомной молекуле с одинаковыми ядрами. В этом случае волновые функции ψ_0 и ψ_n могут обладать одинаковой или противоположной симметрией по отношению к координатам ядер; мы можем поэтому представить произведения $\psi_0 \psi_n^*$ в следующем виде:

$$\psi_0 \psi_n^* = f(r, p) \pm f(p, r), \quad (18)$$

где r и p — координаты обоих ядер. Характеризуя электроны молекулы индексами 2 и 3, а падающий электрон индексом 1, получаем:

$$V = e^2 \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} \right)$$

и

$$I_n(\theta) d\omega = A \frac{4\pi^2 m^2 e^4}{h^4} \frac{k_n}{k} |J_2 + J_3|^2 d\omega, \quad (19)$$

где

$$J_2 = \int \int \int \frac{1}{r_{12}} [f(r, d) \pm f(p, r)] \exp \{ i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{R}_1 \} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 \\ J_3 = \int \int \int \frac{1}{r_{13}} [f(r, p) \pm f(p, r)] \exp \{ i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{R}_1 \} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 \quad (20)$$

Одна из функций, например $f(r, p)$, содержит члены, соответствующие нахождению электрона 2 в поле ядра 1, а другая — члены, соответствующие электрону 2 в поле ядра 2. Мы должны, таким образом, вычислить интеграл:

$$\int \int \int \frac{1}{r_{12}} f(r, p) \exp \{ i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{R}_1 \} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3, \quad (21)$$

выбирая начало координат в ядре 1, и второй интеграл, выбирая начало координат в ядре 2. Мы получаем при этом:

$$J_2 = \exp \left\{ \frac{1}{2} i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{d} \right\} \int \int \int \frac{1}{r_{12}} f(r, p) \exp \{ i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{r}_1 \} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 \pm \\ \pm \exp \left\{ -\frac{1}{2} i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{d} \right\} \int \int \int \frac{1}{r_{12}} f(p, r) \times \\ \times \exp \{ i(kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{p}_1 \} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3, \quad (22)$$

где \vec{d} — расстояние между ядрами.

Функция $f(r, p)$ может быть представлена в следующем виде:

$$f(r, p) = \sum_n f_n(r, d) P_n(\cos u),$$

где u — угол между радиусом-вектором \vec{r} и осью симметрии молекулы. Аналогичным образом получаем:

$$f(p, r) = \sum_n f_n(r, d) (-1)^n P_n(\cos u). \quad (23)$$

Ограничиваясь первым членом разложения, находим:

$$J_2 = \alpha \cos \left\{ \frac{1}{2} (kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{d} \right\}, \quad (24)$$

в зависимости от того, симметрично или антисимметрично произведение $\psi_0 \psi_n^*$ по отношению к координатам ядер. α в этом случае зависит от k , k_n и θ , но не зависит от углов, определяющих ориентацию. Подставляя значения J_2 и J_3 в выражение (19), получаем:

$$I_n(\theta) = A \frac{16\pi^2 m^2 e^4}{h^4} \frac{k_n}{k} \left| \alpha \cos \left\{ \frac{1}{2} (kn_0 - k_n \vec{n}_1) \cdot \vec{d} \right\} \right|^2 + \text{чл. более высоко-} \\ \text{кого порядка.} \quad (25)$$

Усредняя по всем ориентациям оси молекулы, получаем:

$$I_n(\theta) = \frac{8\pi^2 m^2 e^4}{h^4} \frac{k_n}{k} |\alpha|^2 \left(1 \pm \frac{\sin x}{x} \right) + \text{чл. бол. высокого порядка,} \quad (26)$$

где

$$x = \frac{2\pi d}{k} (1 - \lambda^2/\lambda_n^2 - 2\lambda \cos \theta/\lambda_n)^{1/2},$$

а d — расстояние между ядрами в начальном состоянии.

Из выражения (26) следует, что диффракционные эффекты, обусловленные наличием двух ядер, должны иметь место при возбуждении

электронных состояний молекулы в результате столкновений ее с электронами. Противоположная симметрия начального и конечного состояний по отношению к ядрам, приводит к уменьшению рассеяния при малых значениях углов; если же оба состояния обладают одной и той же симметрией по отношению к ядрам, то при малых углах наблюдалось бы увеличение рассеяния. Подобного рода эффект трудно было бы обнаружить экспериментально, благодаря быстрому убыванию $|\alpha|^2$ с увеличением угла рассеяния, подобно тому, как это имеет место при неупругом рассеянии атомами. Наиболее благоприятные условия в этом случае имели бы место для медленных электронов и тяжелых молекул.

Обычно полагают, что волны, рассеянные неупруго от двух одинаковых предметов, являются некогерентными; это верно, однако, лишь для интенсивности совокупности таких волн, но не для отдельных волн, рассеиваемых с данным изменением длины волны, благодаря возбуждению определенного состояния. В случае кристалла состояния, которые могут быть возбуждены, лежат очень близко друг к другу в силу наличия очень большого числа одинаковых областей; разделить отдельные неупруго рассеянные волны не представляется поэтому возможным. Вследствие этого при так называемом „некогерентном“ рассеянии волн от кристаллов дифракционных явлений не наблюдается.

В качестве примера можно сослаться на вычисление вероятности возбуждения *B*-состояния молекулярного водорода; для ознакомления с этим вопросом мы отсылаем читателя к оригинальным статьям ¹⁾.

§ 8. Диссоциация молекул водорода при электронном ударе

Как это было указано в начале главы, квантовая теория молекул указывает на возможность диссоциации молекул при электронном ударе. Мы рассмотрим это явление на примере водорода.

На рис. 47 изображены кривые потенциальной энергии некоторых квантованных состояний молекулы водорода как функции расстояния между ядрами. Кривая *A* соответствует нормальному состоянию молекулы; оно является сингулетным (спины обоих электронов антипараллельны). Минимальное расстояние между ядрами 0,75 Å. *U* отвечает равновесному состоянию молекулы. Кривые *B* и *C* соответствуют аналогичным образом двум наиболее важным возбужденным сингулетным состояниям молекулы H_2 : $2^1\Sigma$ и $2^1\Pi$. Наличие минимума отвечает состоянию устойчивого равновесия. Кривая *D* характеризует нижнее триплетное состояние H_2 , в котором спины либо параллельны, либо антипараллельны. Эта кривая не имеет минимума; атомы отталкивают друг друга и образование стойкой молекулы в этом случае является невозможным. Существование подобного состояния было предсказано в 1927 г. Гейтлером и Лондоном ²⁾. Кривые *E* и *F* соответствуют

¹⁾ Massey and Mohr, loc. cit.

²⁾ Heitler und London, Zs. f. Phys., 44, 455, 1927.

устойчивому и неустойчивому состоянию иона молекулы водорода H_2^+ . Над этими кривыми должна была бы находиться кривая, соответствующая дважды ионизованной молекуле H_2^{++} .

Для изучения энергетических соотношений предположим, что молекула находилась первоначально в нижнем устойчивом состоянии и в нулевом колебательном состоянии, так что вначале расстояние между ядрами соответствовало заштрихованной области чертежа. Применяя принцип Франка-Кондона, мы видим, что переходы из нормального состояния могут происходить лишь к состояниям, обладающим конечными амплитудами колебания внутри заштрихованной области, что соответствует постоянству расстояния между ядрами. Переход с кривой *A* по кривую *D* привел бы к диссоциации молекулы на два нейтральных атома, кинетическая энергия которых составляла бы около 7 вольт. Переходы с кривой *A* по кривые *B* или *C* привели бы лишь к возбуждению и последующему испусканию ультрафиолетового света, тогда как переход на кривую *E* привел бы к ионизации, не сопровождающейся диссоциацией. Переход на кривую *F* вызвал бы, однако, как диссоциацию, так и ионизацию; созданные при этом ионы обладали бы значительной кинетической энергией. Численные данные приведены в таблице I, учитывающей также некоторые дополнительные возможности. Наибольший интерес представляет возможность диссоциации молекулы на нейтральные атомы, обладающие относительной кинетической энергией, а также создание быстрых положительных ионов. Оба эффекта были наблюдаемы экспериментально; первый — Юзом и Скеллетом ¹⁾, Глокером, Бекстером и Далтоном ²⁾, Уиллингтоном и Джонсом ³⁾, второй — Бликни ⁴⁾. Все эффекты, предсказанные в таблице I, подтверждены, таким образом, экспериментально, что является также непосредственным подтверждением квантовой теории образования молекул и принципа Франка-Кондона.

Эти эффекты наблюдаются и для многих других молекул, например CO , N_2 , O_2 ; для более подробного ознакомления с соответствующими данными мы отсылаем читателя к статье Смита „Продукты и процессы ионизации“ ⁵⁾. К сожалению, в этих случаях можно предсказать теоретически

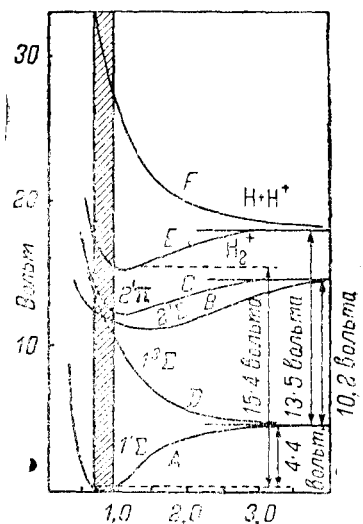
¹⁾ Hughes and Skellet, Phys. Rev., 30, 11, 1927.

²⁾ Glocker, Baxter and Dalton, Journ. Amer. Chem. Soc., 49, 58, 1927.

³⁾ Whiddington and Jones, Phil. Mag., 6, 889, 1928.

⁴⁾ Bleakney, Phys. Rev., 35, 1, 80, 1930.

⁵⁾ H. D. Smyth, Rev. of Modern Phys., 3, 348, 1931.



Расстояние между ядрами в Å
Рис. 47.

Таблица I

Энергия возбужд. в вольтах	Возбуждаемое состояние	Переход	Предполагаемый эффект
11,0	$1^3\Sigma$	$H + H +$ + Кинет. энергия	Быстрые атомы H
11,5	$2^1\Sigma$	$\rightarrow 1^4\Sigma$	Ультрафиолетовое излучение
11,8	$2^3\Sigma$	$\rightarrow 1^3\Sigma$	Непрерывный спектр
12,6	$2^1\Pi$	$\rightarrow 1^4\Sigma$	Ультрафиолетовое излучение
15,6	H_2^+	—	Ионизация без диссоциации
18,0	H_2^+ , энерг. возб. больше эн. дисс.	$\rightarrow H^+ + H$	Ионизация и диссоциация
28,0	H_2^+ (неустойч.)	$\rightarrow H^+ + H$ + Кинет. энергия	Создание быстрых ионов H^+ .
40			
46	H_2^{++} (неустойч.)	$\rightarrow H^+ + H^+ +$ + Кинет. энергия	Дальнейшее создание быстрых ионов H^+
56			

Приведенные выше значения энергии могут быть несколько ошибочными, так как кривые потенциальной энергии возбужденных состояний точно неизвестны.

тически лишь значения критических потенциалов. Вычисление относительных интенсивностей различных эффектов оказалось чересчур сложным. Мессе и Мор¹⁾ рассмотрели вопрос о вероятности диссоциации на нейтральные атомы с помощью теории возбуждения триплетных состояний при учете электронного обмена, рассмотренного нами в главе XI. В качестве приближения они воспользовались плоскими волнами и невозмущенными молекулярными волновыми функциями, так что окончательные результаты по всей вероятности не очень точны. Найдено, однако, что максимальная вероятность диссоциации, имеющей место при энергии превышающей на несколько вольт критический потенциал, весьма велика: она сравнима с упругим сечением. Так же, как и в общем случае триплетных возбуждений (см. главу XI) эта вероятность спадает очень быстро с увеличением скорости столкновения, после того как она достигла максимума

1) Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A., 135, 258, 1932.

вблизи потенциала возбуждения. Опыты Уиддингтона и Джонса¹⁾, сходные с опытами, описанными нами в главе XI для случая неупругих столкновений, указывают на существование потери энергии в 9 V в водороде для электронов с энергиями в 14 и 26 V, что несомненно соответствует рассматриваемому типу возбуждения. Эти результаты показывают, что зависимость вероятности возбуждения от начального значения энергии находится в согласии с теорией; сравнение абсолютных величин оказывается, однако, невозможным, так как в этих опытах наблюдались только неотклоненные электроны.

§ 9. Возбуждение внутримолекулярного движения электронным ударом

Экспериментально установлено, что при столкновении электронов с молекулами возможен обмен энергии электронов с колебательной и вращательной энергиями ядер²⁾. Опыты Рамиена показывают в частности, что 20% столкновений электронов, обладающих энергией 7 вольт, с молекулами водорода принадлежат к типу неупругих и приводят к возбуждению одного колебательного кванта.

Вопрос о возбуждении колебания ядер двухатомных молекул медленными электронами был недавно рассмотрен Мессе. Если энергия взаимодействия молекулы и электрона известна, задача может быть решена с помощью метода искаженных волн (см. § 3. 1 главы VIII). Для молекулы водорода это взаимодействие может быть взято в следующем виде:

$$V = -\epsilon^2 \left\{ e^{-2Zr} \left(\frac{Z}{a_0} + \frac{1}{r} \right) + e^{-2Zp} \left(\frac{Z}{a_0} + \frac{1}{p} \right) \right\},$$

где r, p — расстояния электрона от ядер, Z — эффективный заряд ядра, меняющийся с изменением расстояния между ядрами, а $|\vec{r} - \vec{p}| = \rho$. Z может быть представлено в виде:

$$Z = Z_0 + \left(\frac{\partial Z}{\partial \rho} \right)_{\rho=\rho_0} (\rho - \rho_0),$$

где Z_0 и ρ_0 — значения Z и ρ в положении равновесия. Для интересующей нас цели достаточно знать первые два члена этого ряда, дальнейшее же вычисление производится с помощью формулы (32) § 3. 1 главы VIII, где функции ψ_0 и ψ_n описывают колебательные состояния молекулы, а функции R'_0 и S'_n характеризуют движение возбуждающего электрона в среднем поле молекулы для двух рассматриваемых состояний.

1) Whiddington and Jones, Phil. Mag., 6, 889, 1928.

2) Bailey, Phil. Mag., 46, 213, 1923; 50, 825, 1925; 13, 993, 1932; Bailey and Mc Gee, Phil. Mag., 6, 1073, 1928; Bailey and Duncanson, Phil. Mag., 10, 145, 1930; Brose and Sayman, Ann. der. Phys., 5, 797, 1930; Harries, Zs. f. Phys., 42, 26, 1927; Ramien, Zs. f. Phys., 70, 353, 1931.

С целью получения функций F_0 и \mathcal{E}_n достаточно простой формы это поле заменяется прямоугольной потенциальной ямой.

Полагая $\left(\frac{\partial Z}{\partial \rho}\right)_{\rho=\rho_0}$ равным нулю, мы получаем чересчур малое значение вероятности возбуждения отдельного колебательного кванта (меньше 0,05% на столкновение). Если же мы положим $\left(\frac{\partial Z}{\partial \rho}\right)_{\rho=\rho_0} = \frac{0,28}{a_0}$, как это было найдено для молекулы водорода Розеном¹⁾ с помощью вариационного метода, то для электронов с энергией 7 вольт мы получим значительно лучшее согласие с экспериментальными данными Рамиена. Это обстоятельство свидетельствует о том, что в основном наблюдаемое возбуждение колебаний обусловлено изменением эффективного внешнего молекулярного поля при изменении расстояния между ядрами²⁾. Если же последний эффект во внимание не принимается, вероятность возбуждения чрезвычайно мала, как это и следовало ожидать в виду малости массы электрона по сравнению с массой колеблющихся ядер.

Можно показать, что к рассмотрению столкновений электронов с вращающимися диполями применим метод Борна³⁾, если только дипольный момент удовлетворяет условию:

$$\frac{8\pi^2 m a \varepsilon}{h^2} \ll 1,$$

где m — масса электрона. Можно показать далее, что при таком столкновении происходит обмен энергии, приводя к изменениям вращательного квантового числа на ± 1 . В тех случаях, когда закон взаимодействия является более сложным, теория уже не столь проста; в настоящее время она еще не разработана. Весьма возможно, что и в этих случаях она привела бы к аналогичным результатам.

§ 10. Рассеяние электронов от кристаллических поверхностей

Изучение рассеяния электронов от кристаллических поверхностей представляло существенный интерес в связи с проверкой формулы де-Броглия для электронных волн. Знаменитые опыты Дэвиссона и Джермера⁴⁾, Томсона⁵⁾ и Руппа⁶⁾ общеизвестны; мы не будем поэтому останавливаться здесь на их рассмотрении.

Положение дифракционных максимумов для быстрых электронов определяется той же формулой, что и для рентгеновых лучей обла-

¹⁾ Rosen, Phys. Rev. **38**, 2099, 1931.

²⁾ В отличие от кажущегося изменения, обусловленного изменением положения ядер.

³⁾ Massey, Proc. Camb. Phil. Soc., **28**, 99, 1932.

⁴⁾ Davisson and Germer, Phys. Rev., **30**, 705, 1927.

⁵⁾ G. Thomson, Proc. Roy. Soc. A., **117**, 600, 1928.

⁶⁾ Rupp, Ann. der Phys., **1**, 801, 1929.

дающих такой же длиной волны; распределение интенсивности следует аналогичной формуле; множитель $(\varepsilon^2/mc^2)F$ должен быть, однако, заменен следующим выражением (см. § 1 главы VII):

$$(\varepsilon^2/2mv^2)[Z - F] \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2}.$$

Справедливость этой формулы была установлена многими исследователями (см. § 5. 2 главы IX).

Для электронов с энергией, меньшей 1000 V, наблюдается однако существенное различие между положениями дифракционных максимумов для электронов и для рентгеновых лучей той же длины волны. На рис. 48 приведена зависимость волнового числа, соответствующего селективному отражению, от угла падения. Для рентгеновых лучей кривые сводятся к прямым линиям, определяемым формулой Брэгга

$$nd \sin \theta_n = \lambda;$$

для медленных электронов эти линии, однако, не являются прямыми. Для объяснения этого обстоятельства необходимо принять во внимание потенциальное поле кристалла. Это было осуществлено Морзом¹⁾, рассмотревшим вопрос о движении

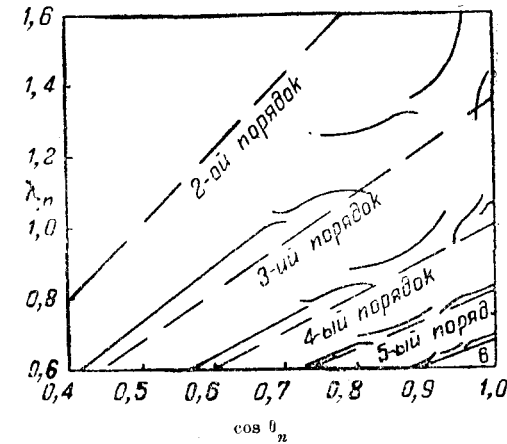


Рис. 48. Кристалл никеля, плоскость (111). Прерывистые линии дают положения аналогичного отражения рентгеновых лучей.

электронов в периодическом поле

$$V(x, y, z) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} A_{xl} e^{ilax} + \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_{ym} e^{im\beta y} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_{zn} e^{in\gamma z},$$

где A_{xl} , A_{ym} и A_{zn} — постоянные, а

$$\alpha, \beta, \gamma = 2\pi/(d_x, d_y, d_z),$$

где d — длины ребер элементарной ячейки в трехмерной решетке. Пользуясь уравнением Хилла²⁾, он нашел, что для электронного пучка, плоскость падения которого параллельна оси z , значения угла падения θ_n и волнового числа k_n определяются формулой

$$k_n^2 \cos^2 \theta_n + \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_n = \frac{n^2 \pi^2}{d_x^2} + \frac{4\pi^2}{d_y^2} f(d_x, k_n \sin \theta_n),$$

¹⁾ Morse, Phys. Rev., **35**, 1310, 1930.

²⁾ Hill, Acta Mathematica, **8**, 1, 1886.

где n — целое число, а V_n — величина, очень медленно изменяющаяся с изменением n и приближенно равная среднему значению разности потенциалов между внутренней частью кристалла и его поверхностью. Функция f мала во всех случаях за исключением таких значений аргумента, при которых

$$k_n \sin \theta_n = \pi m/d_y. \quad (27)$$

В последнем случае она велика и прерывна. Физический смысл этого обстоятельства заключается в том, что когда условие (27) удовлетворяется, резонанс имеет место в направлении оси y и почти все электроны отражаются в направлении, в точности противоположном направлению падающего пучка.

Для более подробного ознакомления с этим вопросом мы отсылаем читателя к оригинальным работам.

§ 10. 1. Вторичная электронная эмиссия. Этому вопросу посвящено большое количество экспериментальных работ; его разрешение находится, однако, в почти зачаточном состоянии. Фрелих рассмотрел недавно этот вопрос теоретически, воспользовавшись приближенным методом Борна (глава VII). Он нашел при этом, что необходимо учитывать отклонение волновых функций, характеризующих поведение электронов в металле, от плоских волн. Окончательные результаты его вычислений показывают, что:

а) Существует нижняя граница энергии первичного электрона, при которой может иметь место вторичная эмиссия. Эта граница составляет примерно 15 вольт, в согласии с опытными данными.

б) При малых скоростях падения эмиссия электронов пропорциональна $E^{1/2}$, где E — энергия первичного электрона, при больших скоростях эмиссия пропорциональна $E^{-3/2} g \left(\frac{E}{W} \right)$, где W — скачок потенциала на поверхности металла.

в) Эмиссия, обусловленная первичными электронами с энергией в 100 вольт, соответствует по порядку величины одному вторичному электрону на каждый падающий первичный электрон.

ГЛАВА XIII

СТОЛКНОВЕНИЯ МЕЖДУ ТЯЖЕЛЫМИ ЧАСТИЦАМИ

§ 1. Физическая сущность рассматриваемых явлений

Под „тяжелыми частицами“ мы будем подразумевать частицы, масса которых велика по сравнению с массой электрона, например атомы, α -частицы и т. д. Столкновения между такими частицами могут быть классифицированы следующим образом.

§ 1. 1. Прохождение быстрых тяжелых частиц через материю. Сюда относится изучение пробега α -частиц, быстрых протонов (H -частиц), нейтронов и тяжелых ядер в различных веществах. Исследование этих явлений производится либо путем наблюдения отдельных следов частиц в камере Вильсона, либо путем подсчета частиц с помощью сцинтилляций, лампового усиления, а также и другими методами. Теоретической задачей является вычисление потери энергии на 1 см пути в данном веществе как функции массы, энергии, заряда частиц и свойств самого вещества. Эти расчеты являются весьма существенными, так как определение потери энергии на 1 см пути часто является единственным средством определения природы или скорости рассматриваемой частицы.

Вопрос о столкновениях между ядрами будет рассмотрен подробно в § 5 главы XV.

§ 1. 2. Передача заряда при столкновении. Эти явления наблюдаются как для медленных, так и для быстрых положительных ионов. Поведение α -частиц в этом отношении рассмотрено подробно в книге Резерфорда, Чадвика и Эллиса ¹⁾. Имеются также опытные данные для более медленных ионов; особый интерес в этом отношении представляет работа Кальмана и Розена ²⁾.

§ 1. 3. Передача возбуждения. Это явление весьма сходно с упомянутым выше явлением передачи заряда; оно состоит в передаче электронного или какого либо иного возбуждения от одной из сталкивающихся систем другой. Оно играет весьма существенную роль в экспериментальной физике, в частности при изучении спектров. Наличие малых примесей посторонних газов часто оказывает весьма

¹⁾ Rutherford, Chadwick and Ellis, Radiation from Radioactive Substances, 1930, стр. 119.

²⁾ Kallmann und Rosen, Zs. f. Phys., 64, 808, 1930.

заметное влияние на интенсивность и характер спектров, получаемых с помощью разрядной трубки. В качестве примера можно привести хорошо известное явление тушения резонансного излучения.

Теоретическая задача состоит в этом случае в вычислении вероятностей передачи возбуждения; особый интерес представляет определение зависимости этих вероятностей от разности энергий обоих возбужденных состояний.

§ 1. 4. Упругие столкновения атомов газа. Развитие техники исследования молекулярных пучков послужило мощным толчком к изучению взаимодействия атомов газа. Оказалось возможным наглядно продемонстрировать волновую природу атомов газа с помощью дифракции пучков гелия и водорода от кристаллических поверхностей¹⁾; недалеко то время, когда окажется практически возможным исследование рассеяния атомов атомами при определенных значениях их относительных скоростей. Интересно поэтому рассчитать эффекты, ожидаемые при упругих столкновениях атомов газа.

Определение эффективных сечений для столкновения газовых атомов представляет интерес также с точки зрения теории вязкости и других явлений переноса в газах. Изменение вязкости газа с температурой зависит от изменения эффективного сечения с относительной скоростью²⁾ частиц.

§ 1. 5. Подвижность положительных ионов в газах. Определение подвижности ионов в газах посвящено очень большое число экспериментальных работ³⁾, однако лишь в последние годы оказалось возможным разобраться в наблюдаемых при этом явлениях. Последние исследования Тиндалля и других авторов⁴⁾ показали, что чрезвычайно существенную роль в таких опытах играет чистота исследуемого газа. Даже в газах, содержащих лишь $10^{-4}\%$ примеси, образуются тяжелые комплексные ионы, обладающие малой подвижностью. В результате хорошей очистки исследовавшихся газов (аргона, гелия и неона) оказалось возможным измерить подвижности свободных ионов в этих газах. Подвижность ионов определяется вероятностью столкновения между атомами газа и ионами; поэтому из измерений подвижности можно получить ценные данные о таких столкновениях.

§ 1. 6. Возбуждение внутримолекулярных движений. Сюда относятся неупругие столкновения между молекулами, приводящие к возбуждению вращения и колебания ядер. При газо-кинетических скоростях это — единственно возможный тип возбуждения. Непосредственных экспериментальных исследований этих явлений при помощи методов, подобных методам, применяемым к изучению столкновений с электронами, пока еще не имеется; косвенные сведения о вероятностях

¹⁾ См. *Fraser*, *Molecular Rays*, 1931, гл. 4.

²⁾ См. § 3 этой главы.

³⁾ *Thomson*, *Conduction of Electricity through Gases*, Cambridge, 1928.

⁴⁾ *Tyndall and Grindley*, *Proc. Roy. Soc. A.*, **110**, 341, 1926; *Tyndall and Powell*, *Proc. Roy. Soc. A.*, **129**, 162, 1930; **134**, 125, 1931; **136**, 145, 1932; *Loeb*, *Phys. Rev.* **38**, 549, 1932; *Bradbury*, *Phys. Rev.*, **40**, 508, 1932.

происходящих при этом процессов могут быть, однако, получены из следующих источников:

а) *Измерение коэффициентов аккомодации.* Коэффициент аккомодации атомов газа на твердой поверхности определяется вероятностью обмена энергии между атомами газа и колеблющимися атомами твердой поверхности. Путем измерений коэффициентов аккомодации могут быть, таким образом, получены сведения о порядке величины этой вероятности и о зависимости ее от температуры.

б) *Скорость звука в газах при высоких температурах.* Резкое расхождение между теоретическими значениями колебательных теплоемкостей газов и их значениями, полученными с помощью измерения скорости звука в этих газах, удалось объяснить после нахождения независимого метода измерения теплоемкостей¹⁾. Полученные с помощью этого метода результаты согласуются с теорией. Вышеупомянутое расхождение обусловлено тем обстоятельством, что обмен энергии между колебательным и поступательным движениями происходит столь медленно, что в звуковой волне газ не находится в состоянии термодинамического равновесия. На основании измерений скорости звука в газах мы можем получить сведения о вероятности обмена колебательной и трансляционной энергии²⁾.

в) *Скорости мономолекулярных химических реакций.* Для того, чтобы мономолекулярная реакция могла иметь место, требуется, согласно опытным данным, наличие некоторой энергии „активации“. Во многих случаях последняя сводится к возбуждению колебания; зависимость скорости реакции от давления разлагающегося газа или от примесей посторонних газов может нам дать, таким образом, сведения о вероятности возбуждения колебания при столкновениях. Обратное — построение теории возбуждения такого рода явилось бы весьма существенным для правильной интерпретации соответствующих экспериментальных данных.

§ 1. 7. Общий случай химических реакций. Сюда может быть отнесено очень большое число явлений. Наиболее простой случай представляют такие столкновения двух молекул, при которых имеет место перераспределение частиц; наиболее важным случаем являются, однако, тройные столкновения, при которых имеет место соединение или диссоциация двух молекул в результате взаимодействия их с некоторой третьей частицей.

Основной задачей является вычисление относительных вероятностей различных типов реакций в зависимости от свойств реагирующих веществ. Очень большое число общих вопросов остается еще необъясненным — сущность катализа, природа энергии активации и т. д.³⁾.

Проведенная нами классификация различных явлений, относящихся к общему случаю столкновений тяжелых частиц, отнюдь не является резкой. Так, например, четыре последних типа явлений весьма сходны

¹⁾ *Blackett, Rideal and Henry*, *Proc. Roy. Soc. A.*, **126**, 319, 1930.

²⁾ *Henry*, *Nature*, **129**, 200, 1932; *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **28**, 249, 1932.

³⁾ См., однако, *Polanyi*, *Atomic reactions*, § 1, 1932.

друг с другом по своей природе; они различаются, однако, с точки зрения методов их экспериментального исследования; мы отделили их друг от друга именно в виду последнего обстоятельства.

Теория столкновений тяжелых частиц в настоящее время, к сожалению, еще не столь полно разработана, как теория электронных столкновений. Количественные результаты получены только для случая быстрых столкновений, при которых оказывается справедливым первое приближение теории Борна, а также для упругих столкновений между атомами газа. Однако, и для других случаев, как например для возбуждения колебательных уровней, были получены некоторые общие результаты; трудности заключаются лишь в сложности соответствующего математического аппарата. Следуя общей схеме, принятой нами для электронных столкновений, мы рассмотрим прежде всего поведение быстрых частиц.

§ 2. Быстрые столкновения тяжелых частиц

§ 2.1. Задерживающая способность вещества для быстрых положительных ионов. Вычисление потери энергии на 1 см пути для быстрых положительных ионов, при прохождении их через какое-либо вещество, весьма сходно с соответствующим вычислением для случая быстрых электронов, произведенным нами в главе XI. Примем следующие обозначения:

M_1 и M_2 — массы ударяющей и ударяемой систем,

$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ — приведенная масса всей системы,

$Z'e$ — заряд иона.

Индексы k, k_n, x, n_0, n имеют тот же смысл, что и в главе XI. Заменяя массу электрона через M и e^2 через $Z'e^2$, мы можем воспользоваться приведенными в этой главе формулами. Дифференциальное сечение как функция импульсов будет, таким образом, равняться [см. гл. XI, ур. (10)]:

$$I_{0n}(K) dK = \frac{128\pi^5 M^2 Z'^2 e^4}{k^2 h^4} \frac{dK}{K^3} |\epsilon_{0n}(K)|^2, \quad (1)$$

где

$$\epsilon_{0n}(K) = \sum_{s=1}^N \int e^{iKx_s} \psi_0 \psi_n^* d\tau,$$

а $\frac{K\hbar}{2\pi}$ — изменение импульса. Эффективное сечение, соответствующее возбуждению n -ого состояния, мы получим, проинтегрировав выражение для дифференциального сечения в пределах возможного изменения импульса. Для рассматриваемых нами в этом параграфе быстрых столкновений эти пределы определяются на основании тех же сообра-

жений, что и для электронов, так как матричные элементы $\epsilon_{0n}(K)$ в обоих случаях одинаковым образом зависят от изменения импульса $\frac{K\hbar}{2\pi}$.

Нижний предел K^1) равняется, таким образом,

$$K_{\min} = 4\pi^2 M (E_n - E_0)/h^2;$$

верхний предел определяется условием сохранения импульса:

$$K_{\max} = 2km/(M+m) \approx 2km/M. \quad (2)$$

В остальном эти вычисления совершенно аналогичны приведенным нами выше соответствующим вычислениям для электронов. В результате мы получаем следующие формулы:

Возбуждение оптических уровней²⁾:

$$Q_{nl, n'v} = (16\pi^4 Z'^2 e^4 / mv^2) |x_{nl, n'v}|^2 \zeta_{nl, n'v} \lg \{ 2mv^2 / (E_{n'v} - E_{nl}) \}. \quad (3)$$

Возбуждение рентгеновых лучей³⁾:

$$Q_{nl}^i = (2\pi Z'^2 e^4 / mv^2 |E_{nl}|) Z_n b_{nl} \lg (2mv^2 / B_{nl}). \quad (4)$$

Первичная ионизация⁴⁾:

$$Q_{nl} = (2\pi Z'^2 e^4 g_{nl} Z_{nl} / mv^2 |E_{nl}|) \lg (2mv^2 / C_{nl}). \quad (5)$$

Потеря энергии на 1 см пути⁵⁾:

$$-\frac{dT}{dx} = (4\pi^4 Z'^2 N / mv^2) Z \lg (2mv^2 / E), \quad (6)$$

где для водорода $E = 1,105 R_h$.

Сравнив эти выражения с соответствующими формулами для электронов, приведенными в главе XI, мы видим, что при больших скоростях столкновения положительный ион с зарядом $+e$ ведет себя точно таким же образом, как и электрон, движущийся с такой же скоростью. Выражения для потери энергии на 1 см пути несколько отличаются в логарифмическом члене: для электронов он равен $\lg (mv^2 / E)$, для тяжелой частицы $\lg \left(\frac{2mv^2}{E} \right)$.

Эти формулы были применены к экспериментальным данным Блекеттом⁶⁾ и Виллиамсом⁷⁾. В таблице I сравнены наблюдаемые и вычисленные значения потери энергии на 1 см пути для α -частиц при прохождении их через некоторые газы; u — скорость падающей частицы, v — скорость электрона в атоме. Согласие является вполне удовлетво-

¹⁾ См. § 1. 1 гл. XI.

²⁾ См. § 3. 1 гл. XI.

³⁾ См. § 3. 2 гл. XI.

⁴⁾ См. § 3. 3 гл. XI.

⁵⁾ См. § 4. 2 гл. XI.

⁶⁾ Blackett, Proc. Roy. Soc. A, 135, 132, 1932.

⁷⁾ Williams. Там же, стр. 108.

рительным, за исключением случая кислорода. Из формулы (6) следует, что для вычисления задерживающей способности вещества мы должны знать среднюю энергию возбуждения E рассматриваемого атома. Для атома кислорода точное определение этой величины является затруднительным; значение E , использованное при получении данных, приведенных в таблице I, было вычислено с помощью формулы (70) и таблицы V главы XI. Источником ошибок может также являться неточность приближения Борна в случае столкновений сравнительно медленных α -частиц с атомом, в котором орбитальная скорость K -электронов очень велика.

Таблица I

Газ	$\frac{n^2}{v^2}$	$\left(\frac{dT}{dx}\right) / (2\pi NZZZ'e^4/mv^2)$	
		Наблюдено	Вычислено
H ₂	0,01	11,1	10,9
H ₂	0,02	9,3	9,9
O ₂	0,01 → 0,5	7,5	9,4

С помощью формулы (6) находим, что частица, прошедшая через газ, содержащий N атомов в 1 см³, при уменьшении скорости от v_1 до v_2 пройдет расстояние R , определяемое выражением

$$R = (ME^2/32\pi^2 Z^2 ZmN) [Ei(y_2) - Ei(y_1)], \quad (7)$$

где Z — заряд ядра атомов, через которые проходит частица, и

$$y_1 = 2 \lg(2mv_1^2/E) \quad y_2 = 2 \lg(2mv_2^2/E),$$

$$Ei(y) = \int_0^y e^{-x} x^{-1} dx.$$

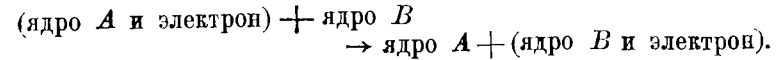
Блекетт¹⁾ сравнил это выражение с экспериментальными данными; при этом оказалось, что для таких газов, как воздух, при соответствующем выборе средней энергии возбуждения E , формула (7) очень хорошо совпадает с результатами экспериментальных данных для α -частиц и быстрых протонов. Для воздуха наилучшее согласие с опытными данными было получено при $E = 127$ электрон-вольт.

§ 2. 2. Захват электронов быстрыми положительными ионами.

а) *Связанные электроны.* В большинстве случаев процессе захвата электронов заключается в вырывании связанного в атоме электрона положительным ионом.

1) Loc. cit.

Общая теория этого явления была изложена нами в главе VIII. Оно относится к столкновениям с перераспределением; происходящая при этом реакция имеет следующий вид:



Мы рассматриваем здесь быстрые столкновения; можно поэтому воспользоваться методом Борна и формулами § 4. 2 главы VIII. Эффективное сечение для перехода электрона из состояния n в поле ядра A в состояние q в поле ядра B определяется [см. ур-ние (68) главы VIII] следующим выражением:

$$Q_{nA \rightarrow qB} = \frac{k_q}{k} \frac{8\pi^3 M^2}{h^4} \int_0^\pi \left| \int \int V(\vec{r}_e, \vec{\rho}) \varphi_q^*(\vec{r}_e) \psi_n(\vec{r}_e) \exp \{ i(k\vec{n}_0 \cdot \vec{r} - k\vec{q} \cdot \vec{\rho}) \} d\vec{r}_e d\vec{\rho} \right|^2 \sin \theta d\theta. \quad (8)$$

Здесь $V(\vec{r}_e, \vec{\rho})$ — энергия взаимодействия ядра A и электрона, $\psi_n(\vec{r}_e)$ — волновая функция электрона в состоянии n в поле ядра A , $\varphi_q(\vec{r}_e)$ — волновая функция того же электрона в состоянии q в поле ядра B , $\vec{\rho}$ — расстояние между ядром A и центром тяжести системы (ядро B + электрон), \vec{r}_e — координаты электрона, M — приведенная масса конечной системы; если массы ядер A и B мы обозначим соответственно через M_A и M_B , а массу электрона — m , то:

$$M = M_A (M_B + m) / (M_A + M_B + m).$$

Волновые числа k и k_q определяются выражениями

$$k = \frac{2\pi v}{h} \frac{(M_A + m) M_B}{M_A + M_B + m}, \quad k_q = \frac{2\pi v'}{h} \frac{(M_B + m) M_A}{M_A + M_B + m}, \quad (9)$$

где v и v' — начальная и конечная относительные скорости. \vec{n}_0 и \vec{n} означают единичные векторы по направлениям начального и конечного относительных движений, так что $\vec{n}_0 \cdot \vec{n} = \cos \theta$.

Для вычисления интеграла (8) удобно перейти от координат $\vec{\rho}$ и \vec{r}_e к координатам \vec{r}_A и \vec{r}_B , характеризующим положение электрона относительно ядер A и B . При этом мы получим

$$Q_{nA \rightarrow qB} = \frac{k_q}{k} \frac{8\pi^3 M^2}{h^4} \int_0^\pi \left| \int \int V(r_A) \varphi_q^*(\vec{r}_B) \psi_n(\vec{r}_A) \times \exp \left\{ \frac{2\pi i}{h} \left[\vec{A} \cdot \vec{r}_A - \vec{B} \cdot \vec{r}_B \right] \right\} d\vec{r}_A d\vec{r}_B \right|^2 \sin \theta d\theta, \quad (10)$$

где

$$V(r_A) = V(\vec{r}_e, \vec{p})$$

$$(M_A + M_B + m) \vec{A} = M_A M_B \vec{v} n_0 - M_A (M_B + m) v' n$$

$$(M_A + M_B + m) \vec{B} = M_B (M_A + m) v n_0 - M_A M_B v' n. \quad (11)$$

Переменные, входящие в двойные интегралы, могут быть теперь разделены, и если атомные волновые функции имеют простой вид, вычисление может быть осуществлено без особых трудностей.

Эффективное сечение $Q_{nA \rightarrow nB}$ для перехода электрона из $1S$ -состояния относительно A в $1S$ -состояние относительно B было определено Бринкманом и Крамерсом¹⁾ с помощью формулы (10). Они нашли, что если скорость v столь велика, что эффективное сечение соответствует лишь малым изменениям импульса, то:

$$Q = \frac{1}{5} 2^{18} \pi a_0^2 Z^7 Z'^5 \cdot s^8 [s^2 + (Z + Z')^2]^{-5} [s^2 + (Z - Z')^2]^{-5}, \quad (12)$$

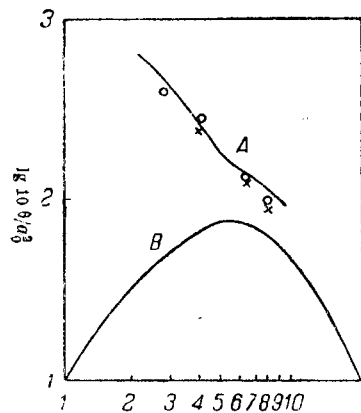
где $s = \frac{hv}{2\pi e^2}$, а Zc , $Z'c$ — заряды ядер.

Отсюда следует, что при больших скоростях вероятность захвата электрона убывает как v^{-12} , в противоположность вероятности возбуждения, которая для оптически разрешенных переходов убывает несколько медленнее, нежели v^{-2} [см. формулу (3) этой главы]. Эта разница обусловлена наличием в рассматриваемой

нами задаче о захвате электрона, в выражении для минимального изменения импульса, члена пропорционального v . В случае возбуждения такого рода член отсутствует.

Опыты Резерфорда²⁾ и Иacobсена³⁾ относятся к захвату электронов α -частицами при прохождении последних через воздух; Бринкман и Крамерс вычислили в связи с этим вероятность захвата электронов из атомов азота. При этом, как показывает рис. 49, было получено хорошее согласие с опытными данными. Эмпирическая закономерность, найденная Резерфордом для зависимости вероятности захвата электрона от скорости:

$$Q \sim v^{-5,6}, \quad (13)$$



$S = hv/2\pi e^2$

Рис. 49.

× — экспериментальные данные Резерфорда. ○ — экспериментальные данные Иacobсена. А — теоретическая кривая для азота. В — теоретическая кривая для захвата в состоянии $1S$ из ядра с зарядом 7.

связана с тем обстоятельством, что вероятность захвата K -электрона возрастает с возрастанием скорости α -частицы, тогда как эффективное сечение для захвата L -электрона убывает примерно как v^{-12} . Совокупность этих двух эффектов приводит к закономерности (13).

Влияние захвата и потери электронов на быстроту потери энергии быстрыми положительными ионами, проходящими через матерю, не было исследовано теоретически; существенная роль процесса поглощения электрона для этих явлений была, однако, отмечена Блекеттом¹⁾.

б) *Свободные электроны*. Захват свободного электрона ионом может быть рассматриваем как спонтанный переход электрона из состояния непрерывного спектра нейтрального атома в дискретное состояние того же атома. Он отличается от предыдущего случая тем, что избыток энергии не переходит здесь в энергию относительного движения, а освобождается в виде излучения.

Согласно теории спонтанного излучения, при падении пучка электронов на атом число переходов в единицу времени, создающих свет частоты ν_n , поляризованный в направлении x , определяется эффективным сечением Q_x^{nlm} , где

$$Q_x^{nlm} = \frac{1}{3} 64\pi^4 (\nu_n/c)^3 \epsilon |X_{x,nlm}|^2/h,$$

$X_{x,nlm}$ — матричный элемент

$$\int \psi_x x \psi_{nlm}^* dt,$$

где ψ_x — волновая функция начального состояния (принадлежащая к непрерывному спектру (см. § 2 главы XIV), ψ_{nlm} — волновая функция конечного состояния. Вычисление эффективных сечений, соответствующих захвату свободных электронов водородоподобными атомами было произведено Штюкельбергом и Морзе²⁾, а также Весселем³⁾.

В связи со сложностью волновых функций ψ_k , характеризующих движение в Кулоновом поле, выражения для эффективных сечений также несколько сложны. Морзе и Штюкельберг рассмотрели подробно частный случай столкновений с медленными электронами, Вессель исследовал также вопрос о захвате быстрых электронов. В последнем случае полное сечение для захвата определяется следующим выражением:

$$Q_e = \frac{16\pi h e^2}{3m^2 c^3} \lambda^5 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3},$$

1) Brinkmann and Kramers, K. Wet. Amst., 33, 973, 1930.

2) Rutherford, Phil. Mag., 47, 277, 1924.

3) Jacobsen, ibid., 10, 401, 1930.

1) Blackett, Proc. Roy. Soc. A., 135, 132, 1932.

2) Stueckelberg and Morse, Phys. Rev., 36, 16, 1930.

3) Wessel, Ann. d. Phys., 5, 611, 1930.

где λ — длина волны испускаемого излучения. Эта формула показывает, что в этом случае наиболее существенную роль играет захват электрона в нормальное состояние, так как число n представляет собой главное квантовое число того состояния, в которое совершается переход. По мере уменьшения скорости электрона относительно большую роль начинает играть захват электрона в состояния с большими значениями n , а также в состояния с большими азимутальными квантовыми числами.

При малых скоростях электронов точное выражение для Q_c уже получено быть не может; в этом случае Морзе и Штукельберг записывают эффективное сечение для захвата электрона в состояние, радиальное и азимутальное квантовые числа которого равны соответственно n и l , в следующем виде:

$$Q_c^{nl} = A(nl) 10^{-20} Z^2 / V \text{ см}^2,$$

где V — энергия падающего электрона в вольтах, Z — эффективный заряд ядра иона, принимающего участие в процессе поглощения, а $A(nl)$ зависит только от n и l . Некоторые значения $A(nl)$ приведены в таблице II. Необходимо отметить, что при малых значениях скорости электрона эффективное сечение стремится к бесконечности, как v^{-2} .

Таблица II
Значения A_{nl} и $A_n = \sum_{l=0}^{n-1} A_{nl}$

n	A_{n0}^*	A_{n1}^p	A_{n2}^d	A_{n3}^f	A_n
1	0,227	—	—	—	0,227
2	0,0335	0,109	—	—	0,143
3	0,0114	0,0403	0,0520	—	0,104
4	0,0053	0,0190	0,0318	0,0254	0,081
5	0,0030	—	—	—	—

Непосредственное сравнение с опытом является затруднительным, так как единственные имеющиеся экспериментальные данные относятся к случаю захвата электронов щелочными ионами. В общих чертах теория находится в согласии с опытом, а для поглощения электронов в P -уровни цезия имеет место также достаточно хорошее количественное совпадение¹⁾. При малых скоростях электронов для захвата в основное состояние наблюдается, однако, расхождение между опытом и теорией.

Теория предсказывает монотонное убывание интенсивности непрерывного поглощения излучения, тогда как экспериментальная кривая имеет определенный максимум²⁾. Подробные вычисления Филлипса³⁾,

¹⁾ Morse and Stueckelberg, loc. cit, Mohler, Phys., Rev., 2, 216, 1929.

²⁾ Lawrence, Phys. Rev., 34, 1056, 1929 и т. д.

³⁾ Phillips, Phys. Rev., 39, 905, 1932.

произведенные с помощью волновых функций Хартри, показали, что этот максимум не обусловлен грубостью применяемой модели атома; происхождение его остается пока необъясненным.

§ 3. Медленные столкновения тяжелых частиц

§ 3. 1. Упругие столкновения атомов газа. Как это было указано в § 1. 4 этой главы, определение эффективных сечений для взаимных столкновений атомов газа, обладающих скоростями, отличными от обычных газо-кинетических, представляет значительный интерес. Помимо полного упругого сечения Q , которое теперь может быть измерено непосредственно с помощью метода молекулярных пучков¹⁾, нас интересуют также эффективные сечения Q_η и Q_D , играющие большую роль при рассмотрении явлений вязкости и диффузии. Они определяются выражениями²⁾:

$$Q_\eta = 2\pi \int_0^\pi I(\theta) \sin^3 \theta d\theta,$$

$$Q_D = 2\pi \int_0^\pi I(\theta) \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin \theta d\theta, \quad (14)$$

где $I(\theta)$ — интенсивность рассеяния, выраженная в относительных координатах. Полное сечение

$$Q = 2\pi \int_0^\pi I(\theta) \sin \theta d\theta \quad (15)$$

[см. ур-ние (18) главы II].

Коэффициент вязкости η газа при абсолютной температуре T определяется выражением

$$\eta = \frac{5}{4j^3 M^2} \left(\frac{2\pi}{jM} \right)^{3/2} \frac{1 + \varepsilon}{\pi R_{11}},$$

где $j = \frac{1}{2kT}$, M — масса атома, k — постоянная Больцмана, а R_{11} определяется интегралом:

$$R_{11} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} v^7 Q_\eta v^{-\frac{1}{2} j M v^2} dv,$$

где v — относительная скорость газовых атомов, ε — поправочный член порядка 10^{-2} .

¹⁾ См. Fraser, Molecular Rays, 1931, гл. 4.

²⁾ См. Massey and Mohr, Proc. Roy. Soc. A. (в печати).

Коэффициент диффузии D двух газов (характеризующихся индексами 1 и 2) определяется выражением

$$D = \frac{3}{16} \pi^{1/2} \left(\frac{M_1 + M_2}{j M_1 M_2} \right)^{1/2} \frac{1}{(v_1 + v_2) P_{12}} \frac{1}{1 - \epsilon_0}$$

где v_1 и v_2 — числа атомов обоих сортов в единице объема, M_1 и M_2 — массы атомов, ϵ_0 — малый поправочный член, зависящий от v_1 и v_2 и

$$P_{12} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} v^5 Q_D \exp \left[-\frac{j M_1 M_2}{M_1 + M_2} v^2 \right] dv.$$

При исследовании изменений, вносимых квантовой теорией в классические формулы, проще всего исходить из представлений об атоме газа как

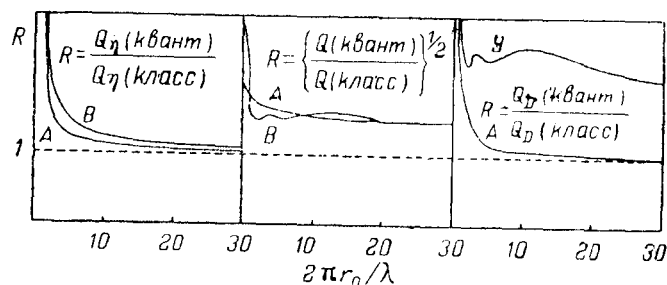


Рис. 50. Отношение эффективных сечений для вязкости, рассеяния и диффузии
А — различные атомы, В — одинаковые атомы.

об упругом шарике. Положим, что энергия взаимодействия между такими шариками

$$V(r) = \infty \quad (r < r_0) \\ = 0 \quad (r > r_0).$$

Классическая теория дает $Q = \pi r_0^2$ и $I(\theta) = \frac{1}{4} r_0^2$.

Для вычисления рассеяния с точки зрения квантовой теории мы можем воспользоваться методом главы II (см. § 3. 2 главы II, где показано, что при малых скоростях $Q \rightarrow 4\pi r_0^2$). Если сталкивающиеся атомы одинаковы, следует также принять во внимание соотношения симметрии, вводимые статистикой Бозе — Эйнштейна (см. главу V). В этом случае $I(\theta)$ содержит только шаровые функции четного порядка, и следовательно оно симметрично относительно $\theta = \frac{1}{2} \pi$. Отсутствие нечетных шаровых функций приводит к увеличению отклонений от классической теории, как это можно видеть из рис. 50, где сравниваются квантовые и классические значения Q , Q_η и Q_D .

Заметим, что по мере уменьшения отношения длины волны к диаметру атома эффективные сечения Q_η и Q_D стремятся к классическим значениям, тогда как полное эффективное сечение Q стремится в этом случае не к своей классической величине, а к ее удвоенному значению. Причина этого расхождения может быть выяснена с помощью рис. 51, на котором приведены вычисленные значения функции углового распределения $I(\theta)$. Из чертежа следует, что $I(\theta)$ отлжно от своего классического значения только при малых углах рассеяния. Угол, при котором отклонения впервые становятся заметными, убывает с уменьшением длины волны; однако величина этого отклонения для данного интервала углов возрастает с уменьшением длины волны таким образом, что Q остается равным удвоенному классическому значению. Q_η и Q_D отличаются, однако, от Q тем, что величина их определяется в основном большими углами отклонения. Если длина волны достаточно мала, то для таких столкновений оказывается справедливой классическая механика. Классическая и квантовая теории никогда не дают одних и тех же результатов для всех углов; всегда имеется небольшой интервал углов, для которого получается различие (см. § 3 главы VII).

В результате введения квантовых поправок в выражение, определяющее Q_η , было найдено, что для атомов гелия упругая сферическая модель твердого шара передает изменение вязкости гелия с изменением температуры в интервале от 25° К до 300° К с точностью в 70%. Это обстоятельство представляет особый интерес, так как наблюдаемые в этой области температур отклонения от законов, полученных с помощью классической твердой шаровой модели атома, были использованы для нахождения закона взаимодействия между атомами гелия¹⁾. Ясно, таким образом, что при вычислении коэффициента вязкости таких легких газов, как гелий и водород, даже при обычных температурах следует пользоваться формулами квантовой теории. Определение эффективных сечений для случая более сложных силовых полей связано с вычислением большого числа фаз. Численное интегрирование соот-

Интенсивность рассеяния на единицу телесного угла

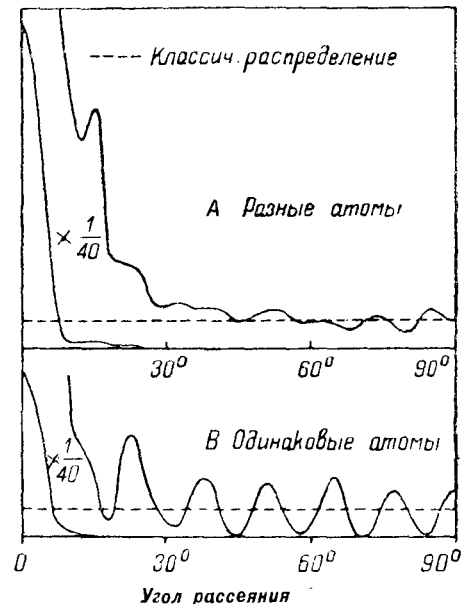


Рис. 51. Угловое распределение при $\frac{2\pi r_0}{\lambda} = 20$.

¹⁾ Fowler, Statistical Mechanics, Гл. X.

ветствующих дифференциальных уравнений оказывается, однако, чрезвычайно затруднительным. Эта трудность может быть преодолена, если пользоваться методом Джеффриса¹⁾ при вычислении фаз, превышающих единицу, и методом Борна²⁾ для тех фаз, которые значительно меньше единицы; промежуточные значения могут быть получены путем интерполяции. Этот метод был применен Мессе и Мором³⁾, причем потенциал взаимодействия между атомами гелия определялся согласно Слейтеру и Кирквуду⁴⁾.

Явлением вязкости и, в меньшей степени, явлением диффузии в газах пользовались в прошлом для определения законов взаимодействия между атомами различных газов. Применение квантовой теории показывает, что с этой целью может быть использован следующий метод: полное упругое сечение Q (не имеющее никакого смысла в классической теории, см. § 1 главы II; § 1 главы X) зависит также от энергии взаимодействия между сталкивающимися атомами и, так как оно более чувствительно к изменениям числа столкновений при малых углах, нежели значения Q_c или Q_D [см. формулы (14) и (15)], оно зависит в большей степени от величины энергии взаимодействия на больших расстояниях. Измерение Q , как функции температуры, позволяет нам, таким образом, определить закон взаимодействия между рассматриваемыми атомами. Благодаря развитию метода молекулярных пучков область практической применимости этого метода стала гораздо шире, чем область применимости двух выше упомянутых методов. Величина Q была вычислена Мессе и Мором для некоторых силовых полей; применение найденных ими формул к экспериментальным данным, относящимся к полным эффективным сечениям, могло бы привести к получению дальнейших сведений о силах взаимодействия между атомами.

При работе с молекулярными пучками форма углового распределения рассеянных атомов представляет интерес как сама по себе, так и с точки зрения определения той угловой разрешающей силы, при которой возможно точное измерение длин свободных путей. Последний вопрос был рассмотрен подробно Мессе и Мором, давшими метод определения разрешающей силы для любого случая. Что же касается возможности экспериментального обнаружения максимумов и минимумов, показанных на рис. 51, то ясно, что при столкновении неодинаковых атомов максвелловское распределение скоростей в падающих пучках будет сглаживать угловые распределения. Для одинаковых же атомов максимум при 90° (или 45° , если один из атомов первоначально покоился) имеется при всех скоростях столкновения; он мог бы быть обнаружен даже и у монохроматических пучков. Таким способом можно было бы проверить непосредственно справедливость статистики Бозе — Эйнштейна, с которой связано наличие этого максимума.

Аналогичные соображения могут быть применены и к случаю движения медленных положительных ионов в газах.

¹⁾ См. § 3 главы VII.

²⁾ См. § 2 главы II.

³⁾ *Massy and Mohr, Nature, 130, 276, 1932.*

⁴⁾ *Slater and Kirkwood, Phys. Rev., 37, 682, 1931.*

§ 3. 2. Передача возбуждения. Важность вопроса о передаче возбуждения между сталкивающимися атомами была уже отмечена нами в начале этой главы. Согласно экспериментальным данным, вероятность такой передачи имеет максимум в том случае, когда разность энергий двух состояний равна нулю. Вероятность передачи возбуждения зависит, повидимому, более существенным образом от разности энергий возбуждения, нежели от относительных скоростей или от природы рассматриваемых систем. В качестве иллюстрации этого утверждения мы рассмотрим результаты некоторых опытов.

§ 3. 21. Тушение резонансного излучения ртути. Хорошо известно, что присутствие постороннего газа в ртутной лампе приводит к уменьшению интенсивности резонансного излучения. Это явление обусловлено дезактивацией возбужденных атомов ртути при столкновении их с молекулами постороннего газа. С помощью опытных данных, относящихся к изменению интенсивности резонансного излучения в присутствии различных посторонних газов, можно определить эффективные сечения, соответствующие дезактивации атомов ртути молекулами газа. Подобного рода наблюдения были произведены Земанским¹⁾; рис. 52 иллюстрирует относительное влияние различных газов на переход $2^3P_1 \rightarrow 2^3P_0$ в атоме ртути, связанный с разностью энергий в 0,218 V. На оси ординат отложены значения эффективного сечения, на оси абсцисс — энергии колебательных уровней газов, близкие к резонансному значению 0,218 V. Ясно, что получаемые при этом точки определяют резонансную кривую обычного типа. Аномально ведет себя лишь окись углерода; очевидно для нее, помимо разности энергий, играют роль также и некоторые другие факторы.

§ 3. 22. Поглощение положительных ионов. „Перезарядка“. Наблюдаемое в газах поглощение пучков медленных положительных ионов почти полностью обусловлено процессом нейтрализации, происходящим в результате захвата ионами электронов из газовых молекул. Различными исследователями было произведено большое число измерений коэффициентов поглощения ионов в газах; во всех случаях было найдено, что коэффициент поглощения является максимальным для ионов того же самого газа; это значит, что положительные ионы поглощаются в наибольшей степени теми газами, которые при потере электрона образуют точно такие же ионы. Так, например, ионы N^+ поглощаются в азоте в меньшей степени, нежели ионы N_2^+ ²⁾; ионы H_2^+ в H_2 поглощаются значительно лучше, нежели ионы H^+ или H_3^+ , несмотря на большие размеры трехатомного иона³⁾.

§ 3. 23. Возбуждение натрия возбужденными атомами ртути. Аналогичные опыты были произведены Бейтлером и Джозефи⁴⁾, освещавшими смесь паров натрия и ртути ртутной лампой и измерившими интенсивность натриевых линий, соответ-

¹⁾ *Zemansky, Phys. Rev., 36, 919, 1930.*

²⁾ *Kallmann und Rosen, Zs. f. Phys., 64, 808, 1930.*

³⁾ *Holzer, Phys. Rev., 36, 1204, 1930.*

⁴⁾ *Beutler and Josephy, Zs. f. Phys., 53, 755, 1929.*

ствующих энергиям возбуждения, близким к энергии возбуждающей линии (длина волны 2537). Принимая во внимание статистические веса термов натриевых линий, они получили для зависимости вероятности возбуждения различных уровней натрия от энергии возбуждения уровня кривую, изображенную на рис. 53. В точке резонанса наблюдается резкий максимум; дополнительный максимум соответствует резонансу с метастабильным 2^3P_0 -состоянием атома ртути.

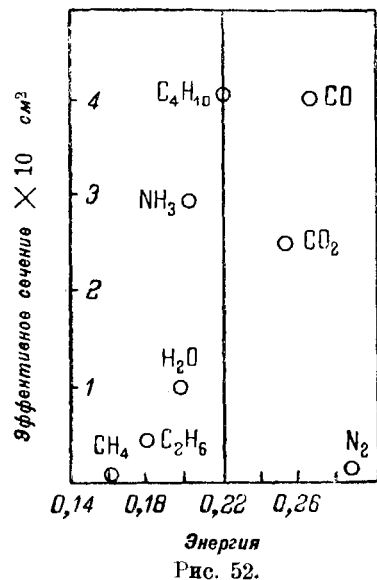
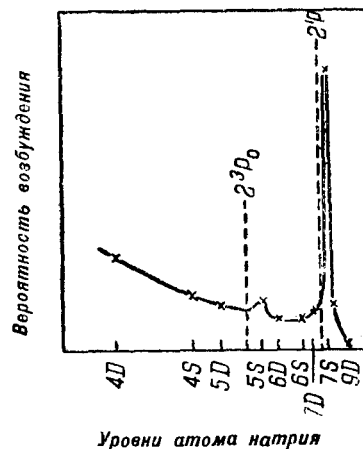


Рис. 52.

Рис. 53. Пунктирные линии указывают энергии уровней ртути 2^1P_0 и 2^3P_0 .

В экспериментальной литературе известно много других примеров этого явления¹⁾; оно играет также большую роль в химической кинетике. При дезактивации молекула оказывает, таким образом, значительно более эффективное воздействие, нежели атом, так как она может приобретать энергию в результате изменения вращательного и колебательного квантового числа, тогда как энергия атома может изменяться лишь за счет изменения его кинетической энергии.

Рассмотрим теперь эти явления с теоретической точки зрения.

§ 3. 3. Теория резонансных явлений. В § 3. 2 главы VIII был рассмотрен метод вычисления эффективных сечений для переходов между двумя состояниями, находящимися в резонансе. В этой главе мы будем придерживаться прежних обозначений, начальное состояние будем характеризовать индексом 0 , конечное—индексом n . Выше было показано, что в двух частных случаях задача сводится к решению системы, состоящей только из двух дифференциальных уравнений. А именно: если состояния 0 и n находятся в приближенном резонансе, или если энергия взаимодействия V_{st} мала для всех

состояний s и t , то вероятность перехода определяется функцией F_{nr} , являющейся решением уравнений

$$\left\{ \begin{aligned} \nabla^2 + k^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{00} \} F_0 &= \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{0n} F_n \\ \nabla^2 + k_n^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{nn} \} F_n &= \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{0n} F_0 \end{aligned} \right. \quad (16)$$

F_0 характеризует падающую и упруго рассеянную волну и имеет следующий асимптотический вид

$$F_0 \sim e^{ikr} + r^{-1} e^{ikr} f(\theta, \varphi), \quad (17)$$

F_n характеризует уходящую волну, так что

$$F_n \sim r^{-1} e^{iknr} f_n(\theta, \varphi).$$

Эффективное сечение, соответствующее переходу $0 \rightarrow n$, определяется выражением

$$Q_n = \frac{k_n}{k} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |f_n(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.$$

В том случае, когда V_{st} мало для всех s и t , V_{0n} может быть рассматриваемо как возмущение, и уравнения (16) могут быть решены с помощью метода последовательных приближений (см. § 3. 2 главы VIII). При этом мы получаем

$$f_n(\theta, \varphi) = -\frac{2\pi M}{h^2} \int V_{0n}(r') F_0(r', \theta) \mathfrak{F}_n(r', \pi - \theta) \, dr', \quad (18)$$

где $F_0(r, \theta)$ и $\mathfrak{F}_n(r, \theta)$ — решения уравнений

$$\{ \nabla^2 + k^2 - (8\pi^2 M/h^2) V_{00} \} F_0 = 0 \quad (19)$$

$$\{ \nabla^2 + k_n^2 - (8\pi^2 M/h^2) V_{nn} \} \mathfrak{F}_n = 0, \quad (20)$$

а θ — угол между направлениями θ, φ и θ', φ' . Этот метод рассмотрен в главе VIII под заголовком „Метод искаженных волн“.

Формула (18) была применена Морзе и Штюкельбергом¹⁾ ко многим вопросам с целью изучения изменения эффективного сечения в зависимости от „нерезкости резонанса“ (разности энергий между начальным и конечным состояниями). Для случая столкновений между атомами пока еще не оказалось возможным вычислить точно величины, стоящие под знаком интеграла в выражении (18); можно, однако, подобрать функции, достаточно точно характеризующие поведение рассматриваемых систем и дающие возможность решить уравнения (19) и (20). Так, например, Морзе и Штюкельберг полагают:

$$V_{00} = \frac{\alpha_0}{r^2}, \quad V_{nn} = \frac{\alpha_n}{r^2}.$$

¹⁾ Franck und Jordan, Anregung von Quantensprünge durch Stöße. 1926, стр. 216.

¹⁾ Morse und Stueckelberg, Ann. der Phys., 9, 579, 1931.

Постоянные α_0 и α_n они выбирают таким образом, что при скоростях, соответствующих температуре рассматриваемого газа, наименьшее расстояние между двумя атомами равнялось сумме их газокинетических радиусов. Уравнения (19) и (20) решаются в этом случае с помощью Бесселевых функций. Для V_{0n} могут быть взяты различные выражения. Если для обеих систем A и B рассматриваемые переходы являются оптически дозволенными, вышеупомянутые авторы полагают для больших r

$$V_{0n}(r) \sim a_2/r^2,$$

где a_2 — постоянная. Если один из переходов дозволен, а второй обладает только квадрупольным моментом, авторы полагают:

$$V_{0n}(r) \sim \frac{a_3}{r^3}.$$

Если оба перехода связаны с квадрупольными моментами, то:

$$V_{0n}(r) \sim \frac{a_4}{r^4}.$$

Если, наконец, ни один из переходов не связан с каким бы то ни было моментом, они полагают:

$$V_{0n}(r) \sim a_5 e^{-\lambda r}.$$

Подобного рода переход может иметь место при электронном обмене или же при условии $S \rightarrow S$.

Для любых атомов функции V_{00} и V_{nn} характеризуют сильные поля отталкивания; в связи с этим волновые функции F_0 и \mathcal{F}_n заметно отличны от нуля лишь на расстояниях, превышающих классическое расстояние наибольшего приближения. Приведенные выше асимптотические выражения для V_{0n} являются, таким образом, достаточно точными. Дальнейшие вычисления сводятся к суммированию рядов интегралов, содержащих Бесселевы функции. Результаты вычислений приведены на рис. 54. Величина β связана с суммой d_0 газокинетических радиусов рассматриваемых атомов следующим соотношением:

$$\beta = 2,2 \left(\frac{d_0}{a_0} \right) M^{1/2},$$

где M — приведенная масса системы, выраженная через массу водородного атома. В случае дипольно-дипольных и дипольно-квадрупольных переходов зависимость эффективного сечения от скорости принимает следующий вид:

$$Q_{0n} \sim \varphi(\Delta E/E)$$

и

$$Q_{0n} \sim E \varphi(\Delta E/E), \quad (21)$$

где ΔE — разность энергий двух состояний („нерезкость резонанса“); функции φ для различных значений β изображены на рисунке.

Для членов, характеризующих взаимодействие между атомами и убывающих экспоненциально, зависимость Q от E и ΔE является более сложной и должна быть представлена в следующем виде:

$$Q_{0n} \sim \chi(E) \varphi\left[\left(\frac{\Delta E}{E}\right), E\right]. \quad (22)$$

Функции $\chi(E)$, $\varphi\left[\left(\frac{\Delta E}{E}\right), E\right]$ изображены на рис. 54с.

Во всех случаях функция φ берется в ее точном виде, определенном экспериментально (рис. 52, 53). Резонанс является особенно рез-

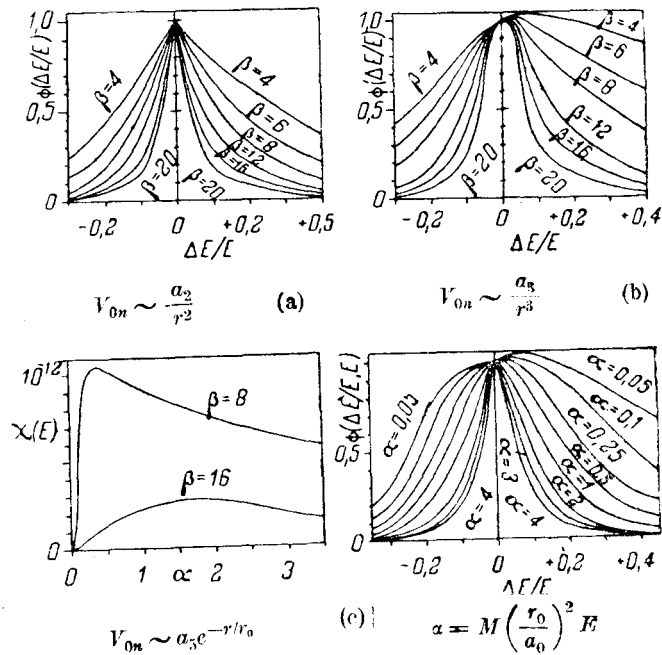


Рис. 54.

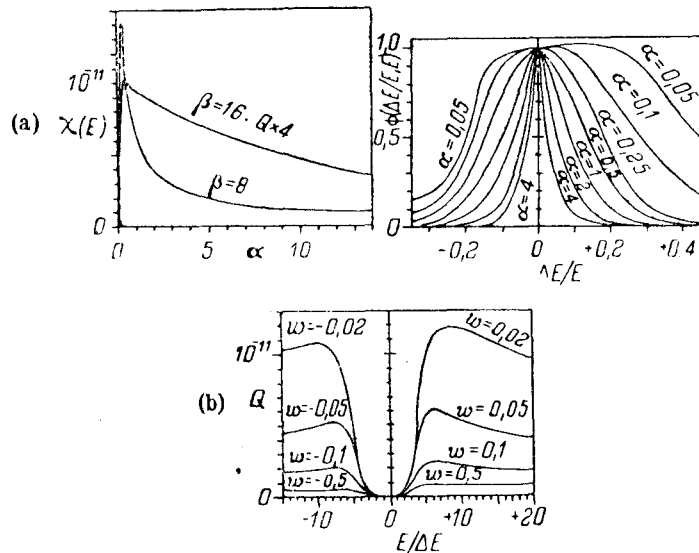
ким для случая оптически дозволенных переходов и больших атомов (больших β).

Остается рассмотреть вопрос о передаче заряда. В этом случае энергия взаимодействия имеет вид

$$V_{0n} \sim \left(\frac{e^2}{a_0} \right) e^{-r/r_0},$$

где r_0 в 2—4 раза превышает a_0 . В этом случае эффективное сечение Q снова имеет вид (22). Функции χ и φ изображены на рис. 55а. Рис. 55б иллюстрирует зависимость эффективного сечения от скорости для различных значений ΔE . Форма этих кривых находится в согласии

с опытами Бартельса ¹⁾, измерившего среднюю длину свободного пути медленных протонов в молекулярном водороде; вычисленные максимумы имеют, однако, место при более низком значении энергии. Это расхождение обусловлено, по всей вероятности, неприменимостью делаемых нами приближений в случае сильного взаимодействия. Ясно, однако, что при малых энергиях взаимодействия вышеописанный метод успешно объясняет экспериментальные данные. Согласно вышеизло-



$$V_{0n} = \left(\frac{e^2}{a_0} \right) e^{-r/r_0} \quad \omega = M \left(\frac{r_0}{a_0} \right)^2 \Delta E$$

Рис. 55.

женной теории, явление резонанса обусловлено, в основном, тем обстоятельством, что в формуле (18) при приближенном равенстве длин волн произведение функций, соответствующих приходящей и уходящей волнам, велико. Матричный элемент V_{0n} в случае резонанса также, по всей вероятности, увеличивается.

§ 3. 31. Случай сильного взаимодействия. Для дальнейшего обобщения теории необходимо найти приближенные методы решения уравнений (16) для тех случаев, когда энергия взаимодействия V_{0n} уже не может считаться малой. Соответствующие методы были разработаны Лондоном ²⁾ и Штюкельбергом ³⁾.

Метод Лондона основывается на рассмотрении физической сущности изучаемых процессов. Если взаимодействие V_{0n} велико, метод возму-

щений оказывается неприменимым в силу наличия адиабатических явлений. При приближении и последующем удалении взаимодействующих систем происходят переходы в обоих направлениях. Метод Штюкельберга и Морзе не учитывает обратных процессов, имеющих место до разделения систем, и дает поэтому слишком большое значение вероятности ¹⁾. Приближение Лондона основывается не на волновых функциях стационарных состояний, не возмущенных взаимодействием, а на волновых функциях, не стационарных в силу учета адиабатических изменений энергии. Метод Лондона аналогичен, таким образом, описанному в § 3. 3 главы VIII методу возмущенных волновых функций. В результате получается формула, отличающаяся от выражения (18) тем, что энергия взаимодействия V_{0n} заменена величиной

$$\frac{1}{2} (E_0 - E_n) \operatorname{arctg} \{ 2 V_{0n} / [E_0 - E_n + V_{00} - V_{nn}] \}. \quad (23)$$

Для получения более точного решения уравнения (16) оказывается необходимым разложить функции F_0^s и F_n^s в ряды Фурье и воспользоваться методом, изложенным в § 1 главы II. Мы полагаем, таким образом,

$$F_0^s = \sum_s F_0^s P_s(\cos \theta), \quad F_n^s = \sum_s F_n^s P_s(\cos \theta). \quad (24)$$

Функции F^s определяются с помощью граничных условий, согласно которым F_0^s должно характеризовать падающую волну, а F_n^s — рассеянную волну; для больших r функции F^s имеют, таким образом, следующий асимптотический вид:

$$F_0^s \sim (2ikr)^{-1} (2s+1) \exp(i\eta_0^s) i^s \times \\ \times \left[\sin \left(kr - \frac{s\pi}{2} + \eta_0^s \right) + q_0^s \exp \left\{ i \left(kr - \frac{s\pi}{2} + \eta_0^s \right) \right\} \right], \\ F_n^s \sim (2ikr)^{-1} (2s+1) q_n^s i^s \exp \{ ikr + 2i\eta_n^s \}, \quad (25)$$

где q_n^s , η_n^s и т. д. — неизвестные постоянные. С помощью этих выражений мы получаем эффективные сечения Q_0 и Q_n для упругого и неупругого столкновений

$$Q_0 = \frac{\pi}{k^2} \sum_s (2s+1) \{ 4 |q_0^s|^2 + 4 \sin^2 \eta_0^s - 4 q_0^s \sin \eta_0^s \cos \eta_0^s \}, \\ Q_n = \frac{\pi}{kk_n} \sum_s (2s+1) |q_n^s|^2. \quad (26)$$

¹⁾ Bartels, Ann., d. Phys., 13, 373, 1932.

²⁾ London, Zs. f. Phys., 74, 143, 1932.

³⁾ Stueckelberg, Helv. Phys. Acta, 5, 370, 1932.

¹⁾ См. рис. 11, гл. VIII.

Если $|q_n^s|^2$ мало по сравнению с единицей, оно может быть вычислено непосредственно с помощью метода Борна¹⁾. При этом мы получаем.

$$q_n^s = \frac{4\pi^3 M}{h^2} \int_0^\infty V_{0n} J_{s+\frac{1}{2}}(kr) J_{s+\frac{1}{2}}(k_n r) r dr. \quad (27)$$

Независимо от величины V_{0n} , эта формула справедлива при достаточно больших s ; при таких s , для которых $q_n^s > \frac{1}{2}$, она однако совершенно не верна; в этом случае необходимо воспользоваться какими-нибудь другими методами.

Для случая большого V_{0n} Штюкельбергом был разработан метод, аналогичный методу § 3 главы VII. Штюкельберг представляет I_0^s в следующем виде:

$$I_0^s = r^{-1} \exp \{ h^{-1} (S_0 + hS_1 + h^2 S_2 + \dots) \} \quad (28)$$

и решает уравнение, получаемое для I_0^s в результате исключения I_n^s из уравнений (16), пренебрегая при этом членами более высокого порядка, нежели h . Форма решения зависит от того, имеет ли функция

$$k^2 - k_n^2 - 8\pi^2 M (V_{00} - V_{nn}) / h^2 \quad (29)$$

вещественный положительный корень. Если такой корень R существует, Штюкельберг получает следующие формулы для q и η (индекс s в дальнейшем опущен).

Полагая

$$(u_n)^2 = k_n^2 - U_{nn} - s(s+1)/r^2, \quad U_{nn} = 8\pi^2 M V_{nn} / h^2,$$

беря для v_0 аналогичное выражение и полагая далее

$$A = \frac{1}{2} (k^2 + k_n^2 - U_{00} - U_{nn}) - s(s+1)/r^2,$$

$$B = \frac{1}{2} [(k^2 - k_n^2 - U_{00} + U_{nn})^2 + 4(U_{0n})^2]^{1/2}$$

$$(v_0)^2 = A + B, \quad (v_n)^2 = A - B,$$

$$N_n = \int_R^{\infty} v_n dr, \quad M_n = \int_0^{\infty} v_n dr,$$

где нижний предел интегрирования обращает подинтегральную функцию в нуль, и, далее:

$$\beta = N_n - M_0 + \int_R^{\infty} v_0 dr, \quad \gamma = -N_0 + M_n - \int_0^{\infty} v_n dr, \quad \tau = N_n - N_0,$$

¹⁾ Born, loc. cit.

мы получаем

$$\left. \begin{aligned} q_0 &= -ie^{-i\beta} [e^{-i(\tau+\beta)} (1 - e^{-2\delta}) \sin \tau + \sin \beta] \\ q_n &= -ie^{i(\beta-\gamma)} e^{-\delta} (1 - e^{-2\delta})^{1/2} \sin \tau \\ \eta_0 &= 2N_n + 2 \int_R^{\infty} v_0 dr - M_0 - \frac{1}{4} (2s+1) \pi \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

Входящая в эти формулы величина δ (т. е. δ_s), играющая существенную роль при определении величины эффективного сечения, при $r = R$ имеет следующий вид:

$$\pi (U_{0n})^2 / 2 \left\{ \frac{d}{dr} (U_{00} + U_{nn}) \right\} (v_0 + v_n).$$

В том случае, когда формула Борна справедлива не для всех s , для вычисления эффективного сечения Q_n необходимо определить q_n^s с помощью формулы (30) для малых значений s и с помощью формулы (27) для больших значений s и интерполировать затем полученные значения для промежуточных значений s . Этот метод не был разработан подробно для какого-либо частного случая, так как энергии V_{00} , V_{nn} и V_{0n} для атомных столкновений неизвестны с достаточной точностью. Совершенно ясно, однако, что этот метод должен привести к меньшим значениям вероятности, нежели теория Борна; Штюкельберг показал, что если корень R существует, то максимальное возможное значение Q составляет примерно πR^2 .

Вышеизложенная теория предсказывает существование резонансных явлений, аналогичных предсказываемым более приближенной теорией § 3. 31; она показывает также, что вблизи резонансной точки эффективное сечение может достигнуть значительно большей величины в том случае, если „точки пересечения“ R не существует, чем в том случае, когда такая точка имеется. Действительно, в первом случае эффективное сечение может значительно превышать газокинетическое

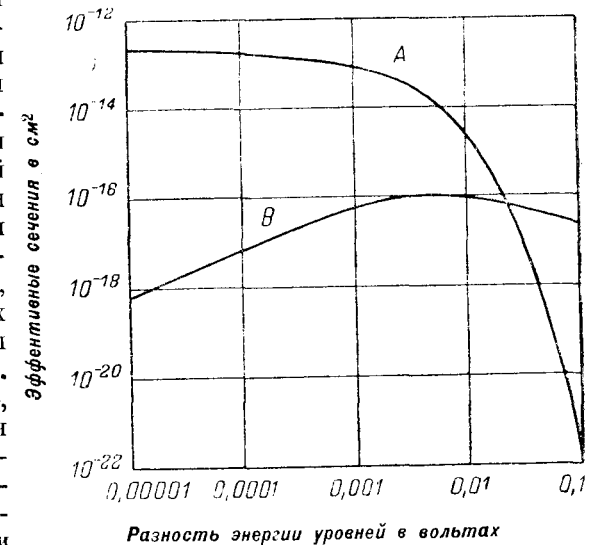


Рис. 56.

A — при отсутствии пересечения, для $V_{0n} = cr^2$, B — при наличии пересечения, для $V_{0n} = cr^2$.

значение. Типичные резонансные кривые для обоих случаев приведены на рис. 56.

В обоих случаях относительная скорость систем соответствует одному электрон-вольту, а M в 10 раз превышает массу атома водорода.

Изложенный выше метод решения ур-ний (16) может быть применен также к случаю неупругих столкновений электронов с атомами; в этом случае V_{00} , V_{nn} и V_{0n} хорошо известны.

§ 3. 4. Прохождение положительных ионов через газы. В этом параграфе мы рассмотрим столкновения положительных ионов, энергия которых превышает 50 V, с атомами газа. Столкновения этого типа могут быть подразделены на:

- 1) упругие столкновения;
- 2) столкновения, приводящие к нейтрализации иона в результате захвата электрона из атома газа;
- 3) неупругие столкновения, сопровождающиеся возбуждением или ионизацией атома газа или падающего иона.

Эффективные сечения для упругих столкновений могут быть вычислены с помощью метода парциальных сечений (см. § 1 главы II); они определяются рядами:

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sum_n (2n + 1) \sin^2 \eta_n, \quad (31)$$

где k , как обычно, равно $\frac{2\pi}{\lambda}$. При этом приходится вычислить большое число членов этого ряда (по крайней мере 400 для протонов с энергией 100 V в гелии); однако в определенной области значений n суммирование может быть заменено интегрированием. Мы можем также воспользоваться колебательным характером величины $\sin \eta_n$ при малых n (меньших 200 для протонов с энергией 100 V в гелии). В таблице II приведены некоторые вычисленные значения Q для столкновений протонов с атомами гелия и аргона.

Эти значения эффективных сечений не очень сильно отличаются от соответствующих газокинетических значений; экспериментальное определение длин свободных путей протонов¹⁾ как для гелия, так и для аргона дает, однако, значительно меньшие величины полных сечений, нежели газокинетические. Причина этого обстоятельства становится ясной при рассмотрении углового распределения рассеянных протонов. Последнее, за исключением случая очень малых углов рассеяния, может быть определено с помощью классических методов²⁾; можно показать, что предельное значение функции углового распределения $I(\theta)$ для угла рассеяния, равного нулю, приближенно равняется $\frac{1}{4} k^3 Q^2$; эта величина значительно превышает Q , за исключением случая очень медленных

¹⁾ Dempster, Phil. Mag., 3, 115, 1927; Ramsauer, Kollath, Lilienthal, Ann. d. Phys., 8, 709, 1931.

²⁾ См. § 3 главы VII.

ионов ($< \frac{1}{10} V$). Объединяя эти результаты, находим, что с увеличением угла рассеяния интенсивность рассеяния убывает столь быстро, что в упомянутых опытах могла быть наблюдаена только небольшая доля истинного числа упругих столкновений.

Таблица II

Газ	Энергия протона в эл.-вольтах	Эффект. сечение в единицах πa_0^2	Газ-кинет. сечение в единицах πa_0^2 (экспер.)
He	90	3,7	2,6
	800	2,0	
A	73	16,4	7,3
	650	10,7	

Столкновения, при которых электрон захватывается ионом, являются обычно неупругими, так как взаимная кинетическая энергия в результате столкновения изменяется. В частном случае точного резонанса, имеющего, например, место при захвате электронов из атомов гелия положительными ионами гелия, столкновения являются упругими в том смысле, что относительная кинетическая энергия остается неизменной. В случае точного резонанса не совсем правильно приписывать акту передачи заряда определенное эффективное сечение, так как при этом невозможно определить экспериментально — является ли наблюдаемый в некотором определенном направлении ион падающим и затем рассеянным, или же он представляет собой ударенный атом, потерявший электрон. Наблюдения указывают на образование большого числа положительных ионов, движущихся почти перпендикулярно к падающему пучку. Как это известно из опытов, в которых падающие ионы могут быть отличены от атомов, потерявших электроны, в этих направлениях оказывается рассеянным лишь очень небольшое число ионов; мы можем поэтому считать, что все ионы, движущиеся под углами, превышающими 45° с направлением падения, представляют собой ударенные атомы, потерявшие электроны, все же остальные ионы являются непосредственно рассеянными ионами падающего пучка. Так как наблюдаемое на опыте поглощение ионов He^+ в гелии отвечает в основном большим углам отклонения, мы можем сказать, на основании нашего предположения, что поглощение обусловлено главным образом передачей заряда. Для определения эффективного сечения, соответствующего поглощению, мы можем воспользоваться формулами, приведенными нами в § 3. 2 главы VIII для предельного значения вероятности неупругого столкновения в случае точного резонанса. Вычисления производятся точно таким же образом, как и для случая упругого сечения,

уже рассмотренного нами в этой главе; для поглощения, обусловленного передачей заряда, сечение оказывается одного порядка величины с газокинетическим сечением, в полном согласии с опытами Кальмана¹⁾ и Розена. В более точной теории, принимающей во внимание также и тождественность ядер (см. главу V), изменяется лишь форма углового распределения рассеянных ионов при промежуточных значениях углов рассеяния, причем получаются максимумы и минимумы, обусловленные интерференцией двух типов рассеянных волн. Так как эффективное сечение очень слабо зависит от этих значений углов, явление это будет играть существенную роль только в случае очень точных измерений углового распределения.

Если захват электрона связан с изменением кинетической энергии, теория явления оказывается совершенно аналогичной теории возбуждения и ионизации, вызываемых ионами. Скорость ионов мала по сравнению с орбитальными скоростями атомных электронов, резонанс же между начальным и конечным состояниями является резким лишь в очень немногих случаях, мы не можем поэтому ограничиться рассмотрением взаимодействия только этих двух состояний; единственным удовлетворительным методом оказывается изложенный в § 3. 3 главы VIII метод возмущенных волновых функций.

Этот метод был применен²⁾ к вычислению эффективных сечений для возбуждения состояния $2^{1}P$ гелия протонами и для захвата электронов протонами. На рис. 57 иллюстрируется зависимость сечения для возбуждения от энергии протонов. Аналогичные кривые были получены также и для сечений, соответствующих захвату электронов. Для сравнения на рисунке приведена также соответствующая кривая для электронов. Очевидное различие в поведении обеих частиц подтверждается также экспериментальными данными как для случая возбуждения, так и для случая ионизации³⁾.

Дальнейший существенный результат этих вычислений заключается в том, что если энергия падающего протона не превосходит некоторую определенную величину, значительно превышающую энергию возбуждения, то вероятность столкновения чрезвычайно мала. Можно показать, что эта „энергия активации“ пропорциональна величине

$$M(\Delta E)^2 R_0^2, \quad (32)$$

где ΔE — энергия возбуждения, M — приведенная масса сталкивающихся систем, R_0 — сумма их радиусов. Существование такой энергии активации, не предсказываемой теорией Борна (см. рис. 57), подтверждается экспериментальными данными; есть также указание на то, что порядок ее величины действительно определяется выражением (32). Так, например, Эпплярд⁴⁾ показал, что ионы натрия с энергией между 300 и 3000 V могут возбуждать атомы ртути ($\Delta E = 5$ V), однако сами они при этом заметно не возбуждаются (для них $\Delta E = 32$ V).

1) Kallmann, Zs. f. Phys., 64, 808, 1930.

2) Massey and Smith, Proc. Roy. Soc. A.; в печати.

3) Döpel, Ann. der Phys., 16, 1, 1933.

4) Appleyard, Proc. Roy. Soc. A., 128, 330, 1930.

Дёпель¹⁾ нашел, что атомы водорода, энергия которых меньше 1000 В, могут возбудить атомы натрия и калия ($\Delta E = 2$ В), но даже при увеличении энергии до 20 000 В нет никаких указаний на наличие их собственного возбуждения при столкновении ($\Delta E = 10$ В).

Изучение механизма прохождения положительных ионов через газы ни в коей степени не может, однако, считаться законченным ни с экспериментальной, ни с теоретической точки зрения²⁾.

§ 3. 5. Столкновения с участием отрицательных ионов. Вплоть до настоящего времени характер поведения отрицательных ионов при столкновениях их с другими частицами был исследован лишь в очень незначительной степени. Экспериментальному изучению

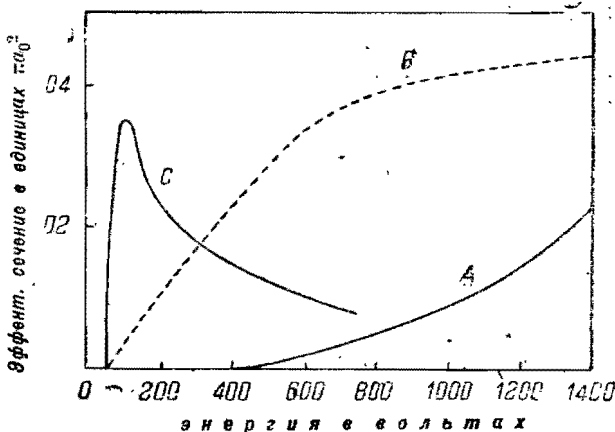


Рис. 57.

А — вычислено для протонов по методу возмущенных волновых функций. В — вычислено для протонов по методу Борна. С — вычислено для электронов (уменьшено для сравнения в три раза).

этого вопроса предстает однако богатое будущее, в связи с чем мы остановимся здесь вкратце на рассмотрении некоторых, наиболее интересных в этом отношении процессов.

Первый из них связан конечно с образованием отрицательных ионов. Мы должны при этом определить вероятность захвата электрона нейтральным атомом. В § 2. 26 мы рассмотрели вопрос о нейтрализации положительных ионов в результате захвата ими электронов и нашли, что по мере того, как скорость электрона уменьшается до нуля, эффективное сечение, соответствующее захвату, стремится к бесконечности. На первый взгляд можно было бы ожидать, что этот результат останется в силе также и для эффективного сечения, соответствующего образованию отрицательного иона. Это, однако, не так, и различие между этими случаями обусловлено характером поля, в ко-

¹⁾ Döpel, Ann. d. Phys., 16, 1, 1933.

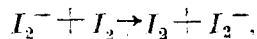
²⁾ Экспериментальный материал см. у J. J. and G. P. Thomson, Conduction of electricity through Gases, часть II, гл. IV, 1933; теоретический — у Massey and Smith (loc. cit.).

тором электрон движется до и после захвата. Эффективное сечение, отвечающее образованию отрицательного иона, можно определить с помощью формулы, приведенной в § 2. 2 (b), просуммировав входящие в нее эффективные сечения по всем стационарным состояниям отрицательного иона (число которых в общем случае конечно). При очень малых скоростях падающего электрона матричный элемент определяется в основном характером волновых функций на больших расстояниях, где функции ψ_k , отвечающие случаям нейтрализации положительного иона и образования отрицательного иона, весьма сильно отличаются друг от друга. В случае положительного иона ψ_k описывает движение в Кулоновом поле, тогда как в случае отрицательного иона ψ_k на больших расстояниях представляет собой плоскую волну. Это различие проявляется уже в том, что эффективное сечение, отвечающее упругим столкновениям в Кулоновом поле, не может быть определено, и даже рассеяние в таком поле при данном значении угла стремится к бесконечности по мере того, как относительная скорость стремится к нулю; рассеяние же нейтральным полем атома может быть определено с помощью конечных значений эффективного сечения, и при любом заданном угле оно при всех условиях остается конечным.

Аналогичные обстоятельства имеют место также и для эффективных сечений, соответствующих захвату электрона: при этом оказывается, что вероятность образования отрицательного иона стремится к нулю по мере того, как скорость падающего электрона убывает до нуля. Это иллюстрируется рис. 57, где приведена зависимость Q_c от энергии электрона для одного из типичных случаев. Эта кривая была вычислена Мессе и Смитом¹⁾ для захвата электронов атомами водорода. Для иона имеется только одно устойчивое состояние с отрицательной энергией; взаимодействие водородного атома и электрона было при этом описано с помощью экспоненциального поля сил. Аперриодические волновые функции, характеризующие поведение отрицательного иона, были вычислены точно, а для периодической волновой функции падающего электрона было взято достаточно хорошее приближение. Интерес этого вычисления заключается в том, что оно показывает, что непрерывный спектр излучения, обусловленный образованием отрицательного иона, не имеет резкой границы и его трудно обнаружить благодаря его малой интенсивности.

Вплоть до настоящего времени подобного рода излучение обнаружено не было, хотя Ольденбергу²⁾ удалось наблюдать излучение, испускаемое при образовании отрицательных ионов иода.

Прохождение отрицательных ионов через газы должно было бы обладать теми же характерными чертами, что и прохождение положительных ионов. Отрицательные ионы иода должны были бы, таким образом, сильно поглощаться иодом в силу резонансного характера реакции:



¹⁾ Неопубликовано.

²⁾ Oldenberg, Phys. Rev. 43, 534, 1933.

в других же газах это поглощение должно было бы иметь меньшую вероятность.

Подобно случаю положительных ионов, упругие столкновения должны были бы играть при этом слабую роль в связи с малостью угловых отклонений. В любом газе, отличном от того, который служит источником ионов, поглощение должно было бы начинаться при сравнительно низкой энергии иона, будучи обусловлено малостью „потенциала активации“, связанного с „ионизацией“ иона [см. выражение (32) § 3. 4, где ΔE — сродство иона к электрону], и должно было бы быстро возрастать по мере увеличения энергии до ее максимального значения. Так как потенциал возбуждения нейтрального атома всегда превышает его сродство к электрону, неупругие столкновения, сопровождающиеся возбуждением атома, имеют место лишь при достаточно высоких значениях энергии.

Имеющийся в настоящее время экспериментальный материал, посвященный этим вопросам, является весьма скудным; большое количество отрицательных ионов иода, наблюдающееся при электрическом разряде в парах иода, могло бы однако представить богатый материал для подобного рода исследований. Изучение поведения отрицательных ионов при столкновениях их с другими частицами могло бы помочь интерпретировать, сложные явления, связанные с электрическим разрядом в газах.

§ 3. 6. Обмен энергии между поступательным движением и молекулярным колебанием и вращением. В этом параграфе мы рассмотрим методы определения вероятности изменения колебательного или вращательного состояния молекулы в результате столкновения ее с каким-либо атомом. При этом мы должны знать энергию взаимодействия молекулы и атома.

Теоретические исследования этого вопроса ограничиваются случаями столкновений, при которых падающий атом движется вдоль прямой линии, соединяющей ядра двухатомной молекулы; для таких столкновений вероятности колебательных переходов будут, вероятно, наибольшими. Нам остается, таким образом, рассмотреть взаимодействие ударяющего атома с одним из атомов молекулы (массы M_B). Энергию взаимодействия мы выберем в следующей форме:

$$C e^{-ar} \quad (33)$$

(что является, вероятно, очень хорошим приближением для расстояний близких к расстоянию наибольшего сближения атомов), где r — расстояние между атомом M_B и ударяющим атомом. Постоянная a может быть определена путем сравнения функции (33) с потенциальными кривыми, построенными Леннард-Джонсом¹⁾ на основании экспериментальных данных о вязкости и теплопроводности газов.

Обозначив через R расстояние между ядром ударяющего атома и центром тяжести молекулы, а через ρ — расстояние между колеблю-

¹⁾ R. H. Fowler, Statistical Mechanics, гл. X, 1929.

щимися ядрами молекулы, мы можем записать функцию (33) в следующем виде:

$$V(R, \rho) = e^{-a(R+\lambda\rho)}, \quad (34)$$

где

$$\lambda = M_C / (M_B + M_C).$$

а M_C — масса второго ядра молекулы. Если мы предположим, что колебание является гармоническим, то характеризующие его волновые функции будут представлять собой полиномы Эрмита. Так как амплитуда колебания ядер мала по сравнению с величиной $1/a$, недиагональные матричные элементы V , взятые по отношению к колебательным волновым функциям, также малы. Для вычисления вероятности перехода с достаточной степенью точности можно поэтому воспользоваться методом, изложенным в § 3.3 главы VIII (методом возмущения с искаженными волнами).

Подобного рода вычисления были произведены Ценером¹⁾ для несколько упрощенного поля и Джексоном и Моттом²⁾ для энергии взаимодействия формы (34). В последнем случае для лобового столкновения были получены следующие результаты: обозначим через $p_{n,m}$ вероятность изменения колебательного квантового числа от n до m (при одном столкновении), пусть M_A — масса ударяющего атома, v_n — относительная скорость до столкновения, v_m — относительная скорость после столкновения. Тогда:

$$p_{n,m} = \frac{32\pi^4}{h} \frac{M_C(M_B + M_C)M_A^2}{a^2 M_B(M_A + M_B + M_C)^2} \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \nu \frac{\sin h \pi q_n \sin h \pi q_m}{(\cos h \pi q_n - \cos h \pi q_m)^2},$$

где

$$m = n \pm 1,$$

$$q_n = 4\pi M^* v_n / h a, \quad q_m = 4\pi M^* v_m / h a,$$

$$M^* = M_A(M_B + M_C) / (M_A + M_B + M_C)$$

и ν — частота вибратора. Вероятность изменения энергии, при котором n меняется больше чем на 1, очень мала, за исключением случая очень больших энергий столкновения.

Основной интерес этих результатов заключается в том, что они показывают, что обмен энергии между поступательным и колебательным движениями происходит сравнительно редко. Так, например, при одномерных столкновениях атомов гелия с молекулами азота при комнатной температуре вероятность дезактивации молекулы, находящейся в первом колебательном состоянии — порядка $6 \cdot 10^{-7}$. Малостью значения вероятности обмена колебательной и поступательной энергии объясняется неудовлетворительность метода измерения скорости звука для определения теплоемкостей газов при высоких температурах³⁾.

¹⁾ Zener, Phys. Rev., 37, 556, 1931.

²⁾ См. § 3.6.

³⁾ См. § 1.5 этой главы.

Аналогичные методы могут быть применены к рассмотрению передачи колебательного возбуждения при столкновении двух молекул. Найдено, что даже в случае точного резонанса вероятность передачи колебательной энергии может быть очень мала. С увеличением приведенной массы обеих молекул и кинетической энергии их относительного движения эффективное сечение, соответствующее резонансу, возрастает, тогда как резонансный эффект является наиболее резким для тяжелых молекул.

Райс¹⁾ применил эту теорию к рассмотрению активации различных сложных молекул при столкновении их с такими же молекулами, с атомами инертных газов и с водородом. Он нашел, что водород при активации оказывается столь же эффективным, как и сами молекулы, причем значительно более эффективным, нежели инертные газы. Эти результаты находятся в согласии с опытными данными.

Теория возбуждения вращательного движения весьма мало разработана; обмен энергии между поступательным и вращательным движениями по всей вероятности осуществляется сравнительно легко²⁾. Вероятность такой передачи должна, конечно, очень резко зависеть от свойств симметрии молекулы. В частности, если молекула возбуждена до столь высокого электронного состояния, что распределение заряда оказывается почти сферически симметричным, возбуждение вращения оказывается затруднительным. Этот результат согласуется с опытными данными³⁾.

§ 3.7. Столкновения атомов с кристаллами. § 3.71. Коэффициенты аккомодации. Последние опыты Штерна и Эстермана⁴⁾ показали, что молекулы могут упруго отражаться от кристаллических поверхностей и что при этом могут быть наблюдаемы дифракционные явления, обусловленные интерференцией соответствующих молекулам де-Броглевских волн. Исследование интенсивности диффракционированных пучков показывает, что большая доля молекул отражается, не обмениваясь энергией с кристаллом; измерения коэффициентов аккомодации подтверждают правильность этого результата.

Тепловой коэффициент аккомодации α атомов газа на твердой поверхности при температуре T определяется следующим выражением:

$$\alpha(T) = \lim_{T_g \rightarrow T_s \rightarrow T'} \frac{T_g' - T_g}{T_s - T_g}, \quad \text{при } T_g \rightarrow T_s \rightarrow T'$$

где T_g — температура атомов газа до столкновения их с твердой поверхностью температуры T_s , а T_g' — их температура после отдельного столкновения. Очевидно, что α является мерой вероятности обмена энергии между атомами газа и колебательным движением твердой решетки. Малое значение α обусловлено, таким образом, малой вероятностью такого обмена. В этом случае применимы соображения, изло-

¹⁾ Rice, Chemical Reviews, 10, 125, 1932.

²⁾ Zener, Phys. Rev., 37, 556, 1931.

³⁾ Rompe, Zs. f. Phys., 65, 428, 1930.

⁴⁾ Stern und Estermann, Zs. f. Phys. 61, 95, 1930.

женные в § 3. 5; они были использованы Джексоном и Моттом¹⁾. При этом были рассмотрены одномерные столкновения, а для вычисления вероятности перехода применена формула (37). Сравнение полученных значений $\alpha(T)$ с опытными данными Робертса²⁾, относящимися к атому гелия и вольфрамовым поверхностям, привело к очень хорошему совпадению. Если энергия взаимодействия между атомом газа и твердой поверхностью описывается функцией Ce^{-aT} , где $a \approx 8 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$, то вычисленная зависимость α от температуры хорошо согласуется с опытными данными. Сравнение абсолютных значений α с теоретическими данными оказывается затруднительным, так как в виду микроскопической неоднородности вольфрамовой проволоки значения эффективных сечений не являются надежными. Тем не менее, успех этой теории свидетельствует о том, что изучение коэффициентов аккомодации должно привести к новым данным о взаимодействии атомов.

Для газов отличных от гелия следует принимать во внимание вандер-Ваальсовы силы притяжения; во время составления этой книги это обстоятельство еще не было учтено удовлетворительным образом.

§ 3. 72. Испускание электронов металлами в результате столкновения с положительными ионами и метастабильными атомами. Уже давно известно, что положительные ионы, не находящиеся в тепловом равновесии с металлической поверхностью, способны вырывать из последней электроны³⁾; Олифант⁴⁾ и ряд других авторов показали, что метастабильные атомы гелия способны вызывать аналогичные эффекты.

Общее объяснение этих явлений было дано Олифантом и Муном⁵⁾, показавшими, что они обусловлены столкновениями второго рода с электронами металла, в результате которых атом дезактивируется, а электрон металла приобретает энергию, достаточную для прохождения через потенциальный барьер поверхности металла. Квантово-механические расчеты, в которых атом рассматривается как медленно движущаяся точка, сталкивающаяся с электронами металла⁶⁾, показали, что вероятность таких столкновений очень велика. На основании этих расчетов может быть определено эффективное сечение для столкновений второго рода. Для более детального ознакомления с этими вопросами мы отсылаем читателя к оригинальным работам.

ГЛАВА XIV

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПЕРЕХОДА ПО МЕТОДУ ВАРИИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ

§ 1. Введение

Задачи, встречающиеся в квантовой механике, могут быть подразделены на две категории: на вычисление характеристических значений энергии и других наблюдаемых величин данной динамической системы и на вычисление вероятности перехода системы из одного состояния в другое под влиянием данного возмущения. В этой главе мы рассмотрим методы, пригодные для решения задач второго типа. В предыдущих главах мы рассматривали вероятность перехода определенного типа, а именно, перехода между двумя состояниями равной не-квантованной энергии, обусловленного возмущением (взаимодействием между атомом и сталкивающейся частицей), не зависящим от времени. Для решения задач такого рода оказалось наиболее удобным пользоваться периодической волновой функцией, содержащей время только в экспоненциальном множителе $\exp(-2\pi i W t / h)$. В этой главе мы рассмотрим методы вычисления вероятностей перехода между состояниями, одно из которых является квантованным; в этом случае нельзя пользоваться периодической волновой функцией, а следует применять „метод вариирования параметров“¹⁾.

Вычисляемые в этой главе вероятности перехода могут быть подразделены на два типа:

1. Вероятности перехода из квантованного состояния в неквантованное состояние с равной энергией, обусловленного воздействием возмущающего поля, не зависящего от времени. Примеры: теория радиоактивного распада, созданная Гамовым; эффект Оже²⁾, спонтанная диссоциация молекулы, находящейся в высоком вращательном состоянии. Теория возмущений не пригодна для решения задач этого рода, так как если возмущающее поле не „мало“, понятие вероятности перехода применено быть не может. Особенно ясно это следует из рассмотрения эффекта Оже, где вычисляется вероятность того, что один из двух электронов, находящихся в возбужденных состояниях в одном и

¹⁾ Jackson and Mott, Proc. Roy. Soc. A., 137, 703, 1932.

²⁾ Roberts, Proc. Soc. A., 129, 146, 1930; 135, 192, 1932.

³⁾ Oliphant, Proc. Roy. Soc. A., 127, 373, 1930.

⁴⁾ Ibid., 124, 228, 1929.

⁵⁾ Ibid., 127, 388, 1930.

⁶⁾ Massey, Proc. Camb. Phil. Soc., 26, 386, 1930 и 27, 460, 1931.

¹⁾ Этот метод был предложен впервые Дираком (Dirac, Proc. Roy. Soc. A., 114, 243, 1929).

²⁾ Auger, J. Phys. Rad., 6, 205, 1925.

том же атоме, вернется в основное состояние, передав при этом свою энергию второму электрону, в результате покидающему атом. В данном случае „возмущающей энергией“ является потенциальная энергия взаимодействия обоих электронов; если она не „мала“ и соответственно этому не мала вероятность перехода за время, обратное частоте соответствующих колебаний, то нет смысла говорить об электронах, как находившихся первоначально в определенных стационарных состояниях.

Для вероятностей перехода между двумя некантованными состояниями это, однако, не так; в задачах подобного рода применимость метода возмущений зависит от совершенно иных обстоятельств, рассмотренных нами в § 2 главы VII.

2. Вероятности переходов, обусловленных возмущающим полем, зависящим от времени. Начальное и конечное состояния могут в этом случае обладать различной энергией. Как начальное, так и конечное состояния могут быть кантованными или некантованными. Примеры: возбуждение и ионизация атома при столкновении с α -частицей, где α -частица трактуется как движущийся центр сил; поглощение излучения и фото-эффект, если световая волна не рассматривается как кантованное поле.

Вероятности первого типа могут быть рассматриваемы как частный случай вероятностей второго типа. Мы исследуем их, в связи с этим, в следующей последовательности:

Вероятности переходов, обусловленных возмущением, зависящим от времени:

- а) для кантованного конечного состояния,
- б) для конечного состояния, принадлежащего к непрерывному энергетическому спектру.

Вероятности переходов, обусловленных периодическим во времени возмущением.

Вероятности, обусловленные возмущением, не зависящим от времени.

§ 2. Возбуждение атома возмущением, зависящим от времени

Для простоты в качестве невозмущенной системы рассмотрим электрон, движущийся в поле бесконечно тяжелого ядра. Обозначим через r координаты электрона, H — оператор Гамильтона невозмущенного атома, а через $\psi_s(\vec{r})$ и W_s — волновые функции (независящие от t) и значения энергии стационарных состояний, удовлетворяющие уравнению

$$(H - W_s)\psi_s = 0. \tag{1}$$

Предположим, что энергия возмущения системы имеет вид $V(\vec{r}, t)$, что первоначально ($t = t_0$) атом находился в состоянии $s = 0$ и, следовательно, исходная волновая функция

$$\psi_0(\vec{r}) \exp(-2\pi i W_0 t/h). \tag{2}$$

Волновую функцию, соответствующую некоторому последующему моменту времени, обозначим через $\Psi(\vec{r}, t)$, она может быть определена начальным условием (2) и волновым уравнением

$$-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - H\Psi = V\Psi. \quad (3)$$

Разложим Ψ в ряд

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_s a_s(t) \psi_s(\vec{r}) \exp(-2\pi i W_s t / \hbar) \quad (4)$$

и предположим, что $|a_s(t)|^2$ определяет вероятность нахождения атома в состоянии s в момент времени t (это справедливо только для квантованных состояний; для случая неквантованных состояний см. § 2. 1). Мы должны, таким образом, определить коэффициенты $a_s(t)$. Подставляя разложение (4) в левую часть уравнения (3), получаем

$$-\frac{\hbar}{2\pi i} \sum_s \left[\frac{d}{dt} a_s(t) \right] \psi_s(\vec{r}) \exp(-2\pi i W_s t / \hbar).$$

Это выражение должно равняться $V\Psi$. Умножив обе его части на одну из функций $\psi_s^*(\vec{r}) \exp(2\pi i W_s t / \hbar)$ и проинтегрировав по всем \vec{r} , получим

$$\frac{d}{dt} a_s(t) = -\frac{2\pi i}{\hbar} \exp(2\pi i W_s t / \hbar) \int \psi_s^*(\vec{r}) V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r}. \quad (5)$$

В начальный момент времени $t = t_0$ все a_s равны нулю, за исключением a_0 , равного единице; проинтегрировав выражение (5), мы получим (для $s \neq 0$)

$$a_s(t) = -\frac{2\pi i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt \left\{ \exp(2\pi i W_s t / \hbar) \int \psi_s^*(\vec{r}) V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} \right\}. \quad (6)$$

Это уравнение является точным. Мы не можем, однако, воспользоваться им для вычисления a_s , так как правая его часть содержит неизвестную функцию Ψ . Если, однако, мы предположим, что функция $\Psi(\vec{r}, t)$ под влиянием возмущения лишь слегка отклоняется от своей первоначальной формы, мы сможем в правой части равенства (6) заменить Ψ выражением

$$\psi_0(\vec{r}) \exp(-2\pi i W_0 t / \hbar),$$

откуда

$$a_s(t) = -\frac{2\pi i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{s0}(t) \exp\{2\pi i (W_s - W_0) t / \hbar\} dt, \quad (7)$$

где

$$V_{s0}(t) = \int \psi_s^*(\vec{r}) V(\vec{r}, t) \psi_0(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (8)$$

Такое приближение допустимо лишь в том случае, когда возмущающаяся энергия „мала“. Смысл этого определения зависит от характера рассматриваемого возмущения. Мы рассмотрим прежде всего возмущение, обусловленное тяжелой заряженной частицей с зарядом E , проходящей через атом, причем частица трактуется как движущийся силовой центр.

Если ядро атома расположено в начале координат, а положение возмущающей частицы в момент времени t определяется функцией

$$\vec{R} = (X, Y, zt),$$

то

$$V(\vec{r}, t) = -zE / |\vec{R} - \vec{r}|. \quad (9)$$

Вероятность того, что после столкновения атом останется в состоянии s , определяется величиной $|a_s(\infty)|^2$, где

$$a_s(\infty) = -\frac{2\pi i}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{s0}(t) \exp[2\pi i(W_s - W_0)t/h] dt. \quad (10)$$

Метод возмущений справедлив только в том случае, когда волновая функция лишь слабо возмущается в течение столкновения. Это условие соблюдается, очевидно, на далеких расстояниях; можно показать, что оно выполняется также и для столкновений, при которых частица проходит через атом, если скорость ее столь велика, что время, в течение которого воздействует возмущение, оказывается малым. Метод возмущений применим также, если заряд частицы E мал по сравнению с Z_0e . Необходимое условие справедливости приближенного метода

$$\sum_s |a_s(\infty)|^2 \ll 1.$$

Это условие, однако, не является еще достаточным; например, для очень медленно меняющихся возмущений $a_s(t)$ может быть порядка единицы во время столкновения даже и в том случае, когда $a_s(\infty)$ мало¹⁾.

Если возмущение обусловлено световой волной, нас интересует определение вероятности $P_s \Delta t$ того, что за время Δt атом будет возбужден в состояние s . Если мы положим $\sum P_s = P$, то вероятность того, что через время t атом останется в своем нормальном состоянии, определится величиной e^{-Pt} ; при этом предполагается, конечно, что спонтанное излучение места не имеет. Метод возмущений будет справедливым, таким образом, для значений t , удовлетворяющих условию:

$$Pt = \sum_s |a_s(t)|^2 \ll 1.$$

¹⁾ См. гл. VIII, § 3.2.

Такого рода возмущения будут рассмотрены нами подробно в § 3; при этом будет показано, что метод возмущений всегда дает точное значение P_s , за исключением того случая, когда световая волна обладает энергией, достаточной для возбуждения атома за время порядка $1/\nu$; практически, однако, последнее никогда места не имеет.

§ 2. 1. Ионизация атома в результате воздействия возмущения, зависящего от времени. Волновая функция $\Psi(\vec{r}, t)$, описывающая состояние атома, находившегося ранее под влиянием возмущения, должна содержать члены, относящиеся к ионизованным состояниям этого атома. Разложение (3) является, таким образом, неполным; мы должны заметить его функцией

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum a_s \psi_s \exp(-2\pi i W_s t/h) + \int a_W(t) \psi_W(\vec{r}) \exp(-2\pi i W t/h) dW, \quad (11)$$

где функции $\psi_W(\vec{r})$ являются решениями уравнения (1) для положительных значений энергии. Эти решения имеют следующий вид:

$$\psi_W(\vec{r}) = S_n^u(\theta, \varphi) N L_{nW}(r),$$

где S_n^u — нормированные шаровые функции:

$$S_n^u = [(2n+1)(n-u)!/4\pi(n+u)!]^{1/2} P_n^u(\cos\theta) e^{i u \varphi},$$

а L — радиальная часть волновой функции, нормированная таким образом, что [см. ур-ние (15) гл. II],

$$L \sim (kr)^{-1} \sin\left(kr - \frac{n\pi}{2} + \tau_n\right),$$

а N — постоянная. В выражении (11) суммирование производится по всем значениям n и u . Полагая

$$N = N(W) = 2k(h\nu)^{-\frac{1}{2}}, \quad (12)$$

можно показать ¹⁾, что функция G , определяемая соотношением

$$\int_0^R \psi_{Wnu}(\vec{r}) \psi_{W'nu}(\vec{r}) d\tau = G(W, R),$$

где интегрирование производится по сфере радиуса R , обладает следующим свойством: если $f(W)$ — любая функция от W , то

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} G(W, R) f(W) dW = f(W').$$

¹⁾ Зоммерфельд, Волновая механика, стр. 206.

Это свойство функции $G(W, R)$ может быть выражено с помощью соотношения

$$G(W, \infty) = \delta(W - W'),$$

где δ — „ δ -функция“ Дирака¹⁾. Легко показать далее, что

$$a_W(t) = -\frac{2\pi i}{h} \int_{t_0}^t V_{W_0}(t) \exp[2\pi i(W - W_0)t/h] dt. \quad (13)$$

Волновая функция может быть таким образом определена с помощью соотношения (11).

Пользуясь ее значением, мы можем определить вероятность выбрасывания электрона из атома. Предположим, что возмущающая функция отлична от нуля лишь для промежутка времени от $t=0$ до $t=T$. Вычислим вероятность $Pdv_0 d\omega$ того, что в течение этого промежутка времени электрон будет выброшен в направлении \vec{n} внутри телесного угла $d\omega$ со скоростью, лежащей в интервале между v_0 и $v_0 + dv_0$.

Исследуем в связи с этим асимптотическую форму функции $\Psi(\vec{r}, t)$ для значений r, t , удовлетворяющих соотношению $r = nv_0 t$ при условии: $tdv_0 \gg Tv_0$, выражающем то обстоятельство, что возмущение прекратилось задолго до момента t . Ясно, что при этих условиях

$$\begin{aligned} Pdv_0 d\omega &= |\Psi|^2 r^2 dr d\omega \\ &= |\Psi|^2 t^3 v_0^2 dv_0 d\omega. \end{aligned} \quad (14)$$

Правая часть этого выражения не должна зависеть от t ; покажем, что это и имеет место в действительности.

Исследуем выражение (11) при больших значениях r и t . Коэффициент $a_W(t)$, определяющийся выражением (13), при $t \rightarrow \infty$ стремится к постоянному значению, так как энергия возмущения V предполагается отличной от нуля только в интервале $0 < t < T$. Заменив $\psi_W(\vec{r})$ ее асимптотическим выражением для больших r , мы видим, что члены, содержащие r и t в интеграле (11), имеют следующую форму:

$$(kr)^{-1} \sin\left(kr - \frac{n\pi}{2} + \eta_n\right) e^{-2\pi i W t/h},$$

или же

$$\begin{aligned} (2ikr)^{-1} \left\{ \exp\left[\frac{2\pi i m}{h} \left(cr - \frac{1}{2} v^2 t\right) - \frac{1}{2} n\pi i + i\eta_n\right] - \right. \\ \left. - \exp\left[\frac{2\pi i m}{h} \left(-cr - \frac{1}{2} v^2 t\right) + \frac{1}{2} n\pi i - i\eta_n\right] \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

¹⁾ Дирак, Квантовая механика, ГТТИ, 1933.

Интегрирование в выражении (11) производится от $W=0$ до $W=\infty$ и, следовательно, от $v=0$ до $v=\infty$. Первый из двух членов выражения (15) имеет в этой области стационарную точку¹⁾; при $v = \frac{r}{t}$ и при достаточно больших значениях r и t весь интеграл определяется областью, близкой к этой точке²⁾. Второй член выражения (15), соответствующий сходящейся волне, такой точкой в рассматриваемой области не обладает, он дает поэтому члены более высокого порядка, нежели $\frac{1}{t}$, так что им можно пренебречь.

Первый член выражения (15) может быть записан в следующем виде:

$$(2ikr)^{-1} \exp \left[\frac{2\pi im}{h} \left\{ -\frac{1}{2} t(v-v_0)^2 + \left(v_0 r - \frac{1}{2} v_0^2 t \right) - \frac{1}{2} n\pi i + i\eta_n \right\} \right], \quad (16)$$

где $v_0 = \frac{r}{t}$. Воспользовавшись формулой

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(iA\zeta^2) d\zeta = (\pi/iA)^{\frac{1}{2}} \quad (\zeta = v - v_0, A = -\pi mt/h),$$

с помощью выражения (11), полагая $dW = mvdv$, получаем:

$$|\Psi| \sim \left| \sum_{n,u} a_{W_0 nu}(\infty) N(W_0) (2ik_0 r)^{-1} (h/mt)^{\frac{1}{2}} m v_0 \exp \left(-\frac{1}{2} n\pi i + i\eta_n \right) S_n^u(\theta, \varphi) \right|,$$

где

$$W_0 = \frac{1}{2} m r_0^2 \text{ и т. д.}$$

или же

$$|\Psi| \sim r^{-1} (m v_0 / t)^{\frac{1}{2}} |f(\theta, \varphi)|, \quad (17)$$

где

$$f(\theta, \varphi) = (h/v_0)^{\frac{1}{2}} \sum_n \sum_u \exp \left(i\eta_n - \frac{1}{2} n\pi i \right) S_n^u(\theta, \varphi) a_{W_0 nu}(\infty)$$

и $r = v_0 t$. Мы увидим в дальнейшем, что $|\Psi|^2$ пропорционально t^{-3} . Из выражения (14) следует, что:

$$P dv_0 d\omega = (m v_0^2 / h) |f(\theta, \varphi)|^2 dv_0 d\omega. \quad (18)$$

¹⁾ Стационарной точкой функции $e^{i f(v)}$ называется такое значение v , при котором $f'(v) = 0$.

²⁾ Этот результат может быть доказан деформированием пути интегрирования в комплексной плоскости.

Принтегрировав по всем θ и φ , определим полную вероятность испускания частицы с энергией, лежащей в интервале между W и $W + dW$:

$$\sum_n \sum_u |a_{Wnu}(\infty)|^2 dW. \tag{19}$$

Используя формулу (13) для a_W , с помощью выражения (16) и формул (16) главы II и (24) главы VI, получаем:

$$f(\theta, \varphi) = \frac{2\pi m}{h^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau' \int dt \mathfrak{F}(r', \pi - \Theta) \times \\ \times V(r', t) \psi_0(\vec{r}') \exp [2\pi i (W - W_0) t/h]. \tag{20}$$

Здесь $\cos \Theta = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos (\varphi - \varphi')$, $\tag{21}$

а $\mathfrak{F}(r, \theta)$ — функция, рассмотренная нами в § 1 главы II:

$$\mathfrak{F}(r, \theta) = \sum_n (2n + 1) i^n e^{i\eta_n} P_n(\cos \theta) L_n(r),$$

имеющая асимптотическую форму:

$$\mathfrak{F} \sim e^{ikz} + r^{-1} e^{ikr} \times \text{Функция от } \theta.$$

Функция $\mathfrak{F}(r', \pi - \Theta)$ представляет, таким образом, плоскую волну, распространяющуюся в направлении, противоположном направлению θ, φ расходящейся волны; она не является, таким образом, комплексно сопряженной волновой функции конечного состояния. Лишь в том случае, когда влиянием ядра на F можно пренебречь (быстрые электроны, малый атомный номер, $2\pi Ze^2/hv \ll 1$), так что $\mathfrak{F}(r', \pi - \Theta)$ может быть заменена выражением $\exp(-i\vec{k}n \cdot \vec{r}')$, функцию \mathfrak{F} можно рассматривать как комплексно сопряженную волновой функции конечного состояния ¹⁾.

§ 3. Переходы, обусловленные периодическим во времени возмущением

В качестве возмущающей энергии выберем:

$$V(\vec{r}, t) = \lambda U(\vec{r}) e^{-2\pi i t} + \lambda U^*(\vec{r}) e^{2\pi i t}, \tag{22}$$

где U зависит от r и не зависит от t ; λ — параметр. Если в момент времени $t=0$ возмущенная система находится в состоянии 0, то в момент времени t волновая функция будет иметь следующий вид:

$$\sum_s a_s(t) \psi_s(\vec{r}) \exp(-2\pi i W_s t/h) + \int a_W(t) \psi_W(\vec{r}) \exp(-2\pi i W t/h) dW, \tag{23}$$

¹⁾ См. главу III, примечание в конце § 2.

где

$$a_s = \frac{\exp [2\pi i (W_s - W_0 - h\nu) t/h] - 1}{W_s - W_0 - h\nu} \lambda U_{s_0} + \frac{\exp [2\pi i (W_s - W_0 + h\nu) t/h] - 1}{W_s - W_0 + h\nu} \lambda U_{s_0}^* \quad (24)$$

и

$$U_{s_0} = \int \psi_s^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_0(\vec{r}) d\tau, \quad (25)$$

причем a_W имеет аналогичный вид.

Для получения результатов, имеющих физический смысл, в случае периодического изменения V время t , в течение которого действует возмущение, должно быть велико по сравнению с $1/\nu$. В противоположность задачам, рассмотренным нами в § 2. 1, где вычислялась вероятность возбуждения при отдельном столкновении, нас интересует сейчас вероятность возбуждения или ионизации атома за промежуток времени Δt ($\Delta t \gg 1/\nu$). Обозначим через $P = \sum P_s$ полную вероятность ионизации или возбуждения за единицу времени; в таком случае вероятность того, что через промежуток времени t атом будет найден в своем нормальном состоянии, определится величиной e^{-Pt} . Применявшийся нами в § 2. 1 метод возмущений, с помощью которого мы получили выражение (25), справедлив только для таких значений t , при которых эта вероятность не очень заметно отличается от единицы, т. е. при

$$Pt \ll 1. \quad (26)$$

Если, однако, возмущение обусловлено воздействием световой волны, P_s будет пропорционально интенсивности последней, т. е. пропорционально λ^2 ; поэтому при вычислении P_s мы можем выбрать λ сколь угодно малой. Можно, таким образом, выбирать t так, что условие (26)

будет удовлетворяться совместно с неравенством $t \gg \frac{1}{\nu}$. Метод возмущений дает, таким образом, точные результаты для таких интенсивностей возмущающего поля, при которых P пропорционально λ^2 , что имеет место для любых световых волн.

Интерпретация получаемых результатов зависит от того, является ли конечное состояние квантованным, или же принадлежит к непрерывному энергетическому спектру. В первом случае вероятность перехода $|a_s|^2$ не должна возрастать с течением времени, за исключением того случая, когда $\nu = \nu_{s_0}$. Где $\nu_{s_0} = \frac{W_s - W_0}{h}$. В этом случае, как легко видеть

из уравнения (24), она пропорциональна квадрату времени. Для получения результата, имеющего физический смысл, следует предположить, что возмущающее поле не является строго монохроматическим, а состоит из большого числа полей с различными частотами, близкими к ν_{s_0} , налагающихся друг на друга. Вероятность перехода мы получим, проинтегрировав $|a_s|^2$ по ν до критического значения ν_{s_0} . Положим

в выражении (22) $\lambda^2 = dv$. Второй член выражения (24) не является очевидно, существенным (если $W_s > W_0$); вероятность перехода равна

$$\int \frac{2[1 - \cos\{2\pi(W_s - W_0 - hv)t/h\}]}{|W_s - W_0 - hv|^2} |U_{s0}|^2 dv.$$

При больших значениях t интеграл определяется главным образом значениями ν близкими к ν_0 и сводится к величине ¹⁾:

$$4\pi^2 |U_{s0}|^2 t/h^2. \quad (27)$$

Подобным способом может быть вычислен коэффициент Эйнштейна B (коэффициент поглощения) ²⁾.

Если конечное состояние принадлежит к непрерывному энергетическому спектру, мы можем воспользоваться методом, изложенным в § 2.1. Предположим, что возмущение действует в течение конечного промежутка времени T , где $\nu T \gg 1$, но $PT \ll 1$. Из выражения (24) следует, что $|a_W(T)|^2 dW$ определяет вероятность испускания электрона с энергией в интервале между W и $W + dW$. При $W = W_0 + hv$ эта функция имеет резкий максимум. Полное число электронов, испускаемых со всевозможными энергиями, равно

$$\int |a_W(T)|^2 dW = \int \frac{2[1 - \cos\{2\pi(W - W_0 - hv)T/h\}]}{|W - W_0 - hv|^2} \lambda^2 |U_{w0}|^2 dW. \quad (28)$$

При $\nu T \rightarrow \infty$ весь интеграл практически соответствует $W = W_0 + hv$, так что выражение (28) может быть заменено через

$$4\pi^2 T |\lambda U_{w0}|^2 / h, \quad \text{где } W = W_0 + hv. \quad (29.1)$$

Это выражение определяет искомую вероятность испускания электрона за время T . Аналогично, число электронов, испускаемых за единицу времени внутри телесного угла $d\omega$, определяется формулой [см. ур-ния (18) и (20)]

$$v \left| \frac{2\pi m}{h^2} \int \mathcal{F}(r', \pi - \theta) \lambda U(r') \psi_0(r') d\tau' \right|^2 d\omega. \quad (29.2)$$

Бете ³⁾ показал, каким образом может быть интерпретирована волновая функция (23) без введения в рассмотрение возмущения, действующего только в течение промежутка времени $0 < t < T$. Если точка r лежит вне атома, то в формуле (23) ψ_s обращается в нуль, а ψ_w может быть заменено асимптотическим выражением:

$$\psi_w \sim 2(hv)^{-\frac{1}{2}} r^{-1} \sin\left(kr - \frac{1}{2}n\pi + \eta_n\right) S_n^u(\theta, \varphi).$$

¹⁾ Мы воспользовались формулой:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx = \pi.$$

²⁾ См. Френкель, Волновая механика, ч. I, стр. 197.

³⁾ Bethe, Ann. d. Phys., 4, 443, 1930.

Воспользовавшись этим выражением для ψ_w , покажем, что при $vt \gg 1$ и $r < vt$ волновая функция (23) соответствует расходящейся волне конечной амплитуды, а при $r > vt$ — волне с амплитудой, равной нулю.

Для точек r вне атома, с помощью формул (23) и (24) получаем:

$$\Psi(r, t) \sim \sum_{n,u} S_n^u(\theta, \varphi) e^{-2\pi i(W_0 + hv)t/h} \int \lambda U_{wnu,0} \frac{1 - e^{-2\pi i(W - W_0 - hv)t/h}}{W - W_0 - hv} \times \\ \times (kr)^{-1} N(W) \sin\left(kr - \frac{1}{2}n\pi + \eta_n\right) dW. \quad (30)$$

Положим

$$2\pi(W - W_0)t/h = \zeta,$$

так что

$$k = 2\pi(2mW)^{\frac{1}{2}}/h = k_0 + \zeta/vt + O(1/t^2).$$

Здесь W_0 означает $W_0 + hv$, а $k_0 = 2\pi(2mW_0)^{\frac{1}{2}}/h$. Если произведение vt велико, то подынтегральная функция выражения (30) имеет резкий максимум при $W = W_0$, и функция (30) может быть заменена следующим выражением:

$$\Psi \sim \sum_{n,u} N(W_0) S_n^u \lambda U_{w,nu,0} e^{-2\pi i W_0 t/h} \int \frac{1 - e^{-i\zeta}}{\zeta} \times \\ \times \sin\left(\frac{kr - \frac{1}{2}n\pi + \eta_n}{kr}\right) d\zeta. \quad (31)$$

Интеграл, стоящий в правой части этого соотношения, равняется

$$(2ikr)^{-1} e^{ikr - \frac{1}{2}n\pi i + i\eta_n} \int [e^{i\zeta r/vt} - e^{i\zeta(r/vt-1)}] \zeta^{-1} d\zeta - \\ - (2ikr)^{-1} e^{-ikr + \frac{1}{2}n\pi i - i\eta_n} \int [e^{-i\zeta r/vt} - e^{i\zeta(-r/vt-1)}] \zeta^{-1} d\zeta. \quad (32)$$

При вещественных A и B имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [e^{iA\zeta} - e^{iB\zeta}] \frac{d\zeta}{\zeta} = i \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\sin A\zeta}{\zeta} - \frac{\sin B\zeta}{\zeta} \right] d\zeta,$$

что, очевидно, равно 0, если знаки A и B одинаковы, и $2\pi i$, если знаки A и B противоположны. Второй интеграл в выражении (32), характеризующий падающую волну, обращается, таким образом, в нуль;

первый интеграл при $r > vt$ обращается в нуль, а при $r < vt$ равняется $2\pi i$. Воспользовавшись выражением (31), мы можем написать

$$\Psi \sim (2kr)^{-1} e^{ikr - 2\pi i W t / h} 2\pi N(W) \sum_{n, u} \exp \left(i q_n - \frac{1}{2} n \pi i \right) S_n^u(\theta, \varphi) \lambda U_{W n u, 0} \quad (r < vt)$$

$$\Psi \sim 0 \quad (r > vt).$$

Отсюда легко могут быть получены формулы (29. 1) и (29. 2), определяющие число испускаемых электронов.

§ 3. 1. Ионизация атома водорода световой волной. Если скалярный и векторный потенциалы световой волны мы положим равными

$$\Phi = \varphi(x, y, z) e^{-2\pi i \nu t} + \text{компл. сопряж.}$$

$$\vec{A} = \vec{a}(x, y, z) e^{-2\pi i \nu t} + \text{компл. сопряж.},$$

то оператор возмущения будет иметь следующий вид:

$$V(\vec{r}, t) = U(\vec{r}) e^{-2\pi i \nu t} + \text{компл. сопряж.},$$

где

$$U(\vec{r}) = -e\varphi + (eh/2\pi imc) \vec{a} \cdot \text{grad (Шредингер)}$$

$$= -e\varphi - e\rho_1(\vec{\sigma} \cdot \vec{a}), \quad (\text{Дирак}).$$

Для волны, плоско поляризованной вдоль оси z , можно положить

$$\varphi = 0, \quad a_x = ae^{iqz}, \quad a_y = a_z = 0.$$

Отсюда

$$U_{so} = \frac{eha}{2\pi imc} \int \psi_s^* e^{iqz} \partial \psi_0 / \partial x d\tau.$$

Если длина световой волны велика по сравнению с радиусом атома, e^{iqz} может быть заменено единицей¹⁾.

§ 4. Переходы, обусловленные независимым от времени возмущением

Приведенные в предыдущем параграфе соотношения справедливы лишь при $\nu = 0$. В § 3. 1 мы рассматривали только переходы в состояния с энергией $W_0 \pm h\nu$, где W_0 — энергия исходного состояния; отсюда следует, что в данном случае возможны лишь переходы в состоя-

ния с энергией W_0 . При таких переходах энергия остается неизменной, как это следует из физической сущности рассматриваемых процессов.

§ 4. 1. Начальное и конечное состояния некантованы. Рассеяние пучка электронов силовым центром. Воспользуемся формулой (29. 2). Функция ψ_0 должна характеризовать пучок электронов, нормированный таким образом, что в единицу времени через единицу его поперечного сечения проходит один электрон, т. е.

$$\psi_0 = v^{-\frac{1}{2}} \exp(i\vec{k}n_0 \cdot \vec{r}),$$

где $U(r)$ — потенциальная энергия электрона в поле рассеивающего центра. Функция $\mathcal{S}(r', \pi - \Theta)$ сводится к $\exp(-i\vec{k}n \cdot \vec{r}')$, где \vec{n} — единичный вектор направления θ, φ . Выражение (29. 2) сводится таким образом к

$$\left| 2\pi m / h^2 \int \exp[i\vec{k}(\vec{n}_0 - \vec{n}) \cdot \vec{r}'] U(\vec{r}') d\tau' \right|^2.$$

Эта формула уже была получена нами с помощью метода Борна [см. ур-ние (5) главы VII].

§ 4. 2. Начальное состояние кантовано, конечное состояние некантовано. В качестве примера рассмотрим нерелятивистскую теорию внутренней конверсии γ -лучей. Предположим, что принадлежащая ядру α -частица с координатой \vec{R} находится в возбужденном состоянии, описываемом волновой функцией $\chi_i(\vec{R})$, а электрон атома находится в нормальном состоянии K -уровня, описываемом волновой функцией $\psi_f(\vec{r})$. Нас интересует определение вероятности такого перехода α -частицы в ее нормальное состояние [с волновой функцией $\chi_f(\vec{R})$], в результате которого ее энергия передается электрону, покидающему при этом атом. Если энергия взаимодействия:

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = -2e^2 / |\vec{R} - \vec{r}|,$$

то, согласно выражению (23), эта вероятность равняется:

$$\sum \frac{4\pi^2}{h} \left| \int \int d\vec{r} d\vec{R} \chi_f^* \psi_f^* V(\vec{r}, \vec{R}) \chi_i \psi_i \right|^2 d\omega, \quad (33)$$

где ψ_f — волновая функция конечного состояния, нормированная так же, как в уравнении (12), а суммирование производится по всем возможным конечным состояниям с соответствующей энергией.

Пользуясь этим методом, Борн¹⁾ рассмотрел вопрос о вероятности вылета α -частицы из радиоактивного ядра.

¹⁾ См. *Зоммерфельд*, Волновая механика и *Ann. d. Phys.*, **4**, 409, 1930; *Hulme*, *Proc. Roy. Soc. A.*, **133**, 381, 1931; *Sauter*, *Ann. d. Phys.*, **9**, 217, 1931.

ГЛАВА XV

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ. СТОЛКНОВЕНИЯ, СОПРОВОЖДАЮЩИЕСЯ ИЗЛУЧЕНИЕМ. ОБРАЗОВАНИЕ ПАР ЭЛЕКТРОНОВ. АННИГИЛЯЦИЯ ПОЗИТРОНОВ.

§ 1. Релятивистская квантовая механика.
Применение запаздывающих потенциалов

Дираком ¹⁾ была построена вполне законченная релятивистская теория движения одной частицы (протона или электрона) в электромагнитном поле. Теория Дирака была применена к водородному атому ²⁾, к вопросу о рассеянии быстрых электронов ядром ³⁾ и к вопросу о взаимодействии электрона с электромагнитным излучением высокой частоты. Вполне законченной релятивистской теории взаимодействия двух или большего числа частиц в настоящее время, однако, еще не существует. Некоторый ограниченный круг относящихся сюда вопросов может быть, все же, разрешен; а именно, можно вычислить вероятности переходов при условии справедливости первого приближения теории возмущений (первого приближения Борна).

В качестве иллюстрации метода определения вероятностей переходов мы рассмотрим так называемый эффект Оже. Предположим, что тяжелый атом потерял *K*-электрон; в таком случае имеется конечная вероятность перехода *L*-электрона в *K*-оболочку с сопутствующим испусканием энергии в виде светового кванта или с передачей ее одному из остальных атомных электронов. Вычислим вероятность того, что *L*-электрон передает свою энергию оптическому электрону.

Метод, которым мы будем при этом пользоваться, исключает возможность применения антисимметричных волновых функций для начального или конечного состояний. Мы будем рассматривать электроны в отдельности друг от друга; положение внутреннего электрона определим вектором \vec{R} , через $\chi_i(\vec{R})$ обозначим волновую функцию его начального состояния в *L*-оболочке, а через $\chi_f(\vec{R})$ — волновую функцию,

характеризующую его конечное состояние в *K*-оболочке. Волновую функцию начального состояния оптического электрона обозначим через $\psi_i(\vec{r})$, а функцию конечного ионизованного состояния через $\psi_f(\vec{r})$. Роль антисимметрии мы рассмотрим в конце этого параграфа.

Внутренний электрон может вернуться на *K*-уровень либо в результате передачи своей энергии другому электрону, либо в результате испускания светового кванта. Вероятность последнего события, отнесенную к единице времени, обозначают через $A_{i \rightarrow f}$, причем *A* называется коэффициентом Эйнштейна. Согласно нерелятивистской теории ($c \rightarrow \infty$), коэффициент *A* равняется нулю, так как в отсутствие поля излучения атом всегда должен оставаться в возбужденном состоянии. Дираку ¹⁾ удалось определить коэффициент *A* путем рассмотрения поля излучения как совокупности световых квантов, подчиняющихся квантово-механическим законам. До формулировки теории Дирака коэффициент *A* определялся следующим образом ²⁾.

Излучающая система — в нашем случае *L*-электрон — рассматривалась как классически распределенный заряд с плотностью:

$$\rho_{\mu} \exp(-2\pi i \nu_{\mu} t) + \text{компл. сопряж.}, \quad (1)$$

где

$$\rho_{\mu} = -e \chi_i^* \chi_i.$$

Соответствующий этой плотности заряда вектор тока

$$\vec{j}_{\mu} \exp(-2\pi i \nu_{\mu} t) + \text{компл. сопряж.},$$

где

$$\vec{j}_{\mu} = e \chi_i^* \vec{\sigma} \chi_i \quad (\text{уравнение Дирака})$$

$$= \frac{eh}{4\pi im} (\chi_f \text{grad} \chi_i - \chi_f \text{grad} \chi_i^*) \quad (\text{уравнение Шредингера}).$$

Согласно классической теории, такая плотность заряда должна создавать осциллирующее электромагнитное поле, излучающее энергию. Энергия, излучаемая в единицу времени, может быть вычислена. Разделив ее значение на энергию светового кванта $E_i - E_f$, мы получим формулу, определяющую коэффициент *A*.

Ясно, что такой метод вычисления коэффициента *A* представляет собой неудовлетворительную смесь классической и квантовой механики; тем не менее он может оказаться нам полезным при построении релятивистской теории взаимодействия двух частиц. Определим теперь поле, обусловленное наличием осциллирующей плотности заряда (1).

¹⁾ Dirac, Proc. Roy. Soc. A., 117, 618, 1928; Основы квантовой механики, гл. XIII.

²⁾ Darwin, Proc. Roy. Soc., 118, 654, 1928; Gordon, Zs. f. Phys., 48, 1, 1928.

³⁾ См. § 4, гл. IV.

¹⁾ Dirac, Proc. Roy. Soc. A., 114, 243, 1927 и Основы квантовой механики

²⁾ Klein, Zs. f. Phys., 41, 407, 1927.

Согласно классической электромагнитной теории, скалярный потенциал Φ и векторный потенциал \vec{A} , связанные с этой плотностью заряда, определяются дифференциальными уравнениями

$$\nabla^2 \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = -4\pi \rho_{fi} \exp(-2\pi i \nu_{fi} t) + \dots \quad (2.1)$$

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j}_{fi} \exp(-2\pi i \nu_{fi} t) + \dots \quad (2.2)$$

Для нахождения частного решения этих уравнений мы положим

$$\left. \begin{aligned} \Phi &= \varphi(x, y, z) \exp(-2\pi i \nu_{fi} t) \\ \vec{A} &= \vec{a}(x, y, z) \exp(-2\pi i \nu_{fi} t) \end{aligned} \right\} + \text{компл. сопряж.} \quad (3)$$

и получим

$$(\nabla^2 + 4\pi^2 \nu_{fi}^2 / c^2) \varphi = -4\pi \rho_{fi}. \quad (4)$$

Решение этого уравнения, характеризующее расходящуюся волну:

$$\varphi = \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \exp(2\pi i \nu_{fi} |\vec{r} - \vec{r}'| / c) \rho_{fi}(x', y', z') d\tau'. \quad (5)$$

Для больших r с помощью асимптотического выражения (5) получаем

$$\Phi \sim r^{-1} \exp\{2\pi i \nu_{fi} (r/c - t)\} \int \exp(-2\pi i \nu_{fi} \vec{n} \cdot \vec{r}' / c) \rho_{fi}(x', y', z') d\tau' + \dots$$

где $\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$. Аналогичное выражение получается и для векторного потенциала; мы можем, таким образом, вычислить скорость излучения энергии.

Для определения вероятности того, что L -электрон передаст свою энергию оптическому электрону, мы будем поступать так, как если бы поле Φ , \vec{A} , определяемое выражением (5), существовало на самом деле и вычислим его влияние на оптический электрон, воспользовавшись с этой целью методом, изложенным в § 3 главы XIV. Вероятность испускания электрона возрастает с течением времени только в том случае, если получаемая электронами энергия равняется $\pm h\nu_{fi}$. Вероятность испускания за единицу времени [глава XIV, ур-ние (29.1)]:

$$\frac{4\pi^2}{h} \left| \int \psi_f^* \{ -\varepsilon \varphi - \varepsilon \rho_1 \vec{a} \cdot \vec{\sigma} \} \psi_i d\tau \right|^2, \quad (6)$$

где ψ_f волновая функция конечного состояния электрона, нормированная таким образом, чтобы характеризовать испускание одного электрона за единицу времени.

Полагая в выражении (5) $c \rightarrow \infty$, получаем

$$\varphi = -\varepsilon \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \chi_f^*(\vec{r}') \chi_i(\vec{r}') d\tau',$$

$$\vec{a} = 0,$$

причем (6) сводится к нерелятивистской формуле главы XIV [уравнение (33)].

При таком методе рассмотрения не имеет смысла говорить о том — испущен ли оптический электрон в результате непосредственного взаимодействия с L -электроном или же световой квант вначале испущен, а потом поглощен атомом. Выражение (6) учитывает оба процесса.

Формула (6) не принимает во внимание свойств антисимметрии нерелятивистской квантовой механики. Мы можем получить выражение, которое при $c \rightarrow \infty$ будет стремиться к нерелятивистской формуле с антисимметричными волновыми функциями. Обозначим выражение (6) через $|A|^2$. Оно определяет вероятность возвращения L -электрона в нормальное состояние при сопутствующем испускании оптического электрона. Аналогично мы можем определить вероятность $|B|^2$ перехода оптического электрона в нормальное состояние при сопутствующем испускании L -электрона. Искомое выражение имеет вид:

$$|A - B|^2,$$

и представляет собой точное выражение для числа испускаемых электронов обоого рода. Оно должно быть просуммировано по всем возможным конечным состояниям.

Для эффекта Оже подобные вычисления еще не выполнены.

§ 2. Релятивистская трактовка задач теории столкновений

Возбуждение и ионизация атомов быстрыми электронами могут быть рассмотрены с помощью метода ¹⁾, изложенного в § 1. Рассмотрим поведение пучка электронов, падающего на атом водорода, который находится в нормальном состоянии, описываемом функцией $\psi_i(\vec{r}) \times \exp(-2\pi i E_i t / h)$. Нас интересует вероятность рассеяния электрона в данном направлении при одновременном возбуждении атома в состояние, характеризующееся волновой функцией $\psi_f(\vec{r}) \exp(-2\pi i E_f t / h)$.

Взаимодействие двух электронов мы будем трактовать как малое возмущение. В качестве невозмущенной волновой функции падающих электронов можно было бы, поэтому, выбрать волновую функцию, описывающую поток электронов, рассеиваемых ядром [см. уравнение (23) главы III]. В виду соотношений $v \sim c$, $\frac{e^2}{hw} \ll 1$, эта функция может

¹⁾ Möller, Zs. f. Phys., 70, 786, 1931.

быть заменена плоской волной [при этом мы пренебрегаем величиной $\left(\frac{e^2}{hc}\right)^2$, (см. § 3)]. В качестве волновой функции нулевого порядка χ_i мы выберем поэтому плоскую волну, нормированную таким образом, чтобы она описывала прохождение одного электрона в единицу времени через единицу поперечного сечения, так что

$$\chi_i(\vec{R}) = e^{-\frac{1}{2}} \exp\{2\pi i (P_i Z - Wt)/h\}.$$

При определении вероятности рассеяния мы будем рассматривать атом как переменное распределение заряда, плотность которого [см. ур-ние (1)]

$$-e\psi_f^*(\vec{r})\psi_i(\vec{r}) \exp\{2\pi i (E_f - E_i)t/h\}, \quad (7)$$

при соответствующем выражении для тока; мы определим влияние связанного с этим зарядом поля на падающий пучок электронов. Для этого мы воспользуемся методом, изложенным в § 3 главы XIV. Согласно теории, электроны должны рассеиваться с энергией $W - E_f + E_i$. При этом в выражению (7) комплексно сопряженный член прибавлять не следует, так как он соответствует электронам, рассеянным с энергией $W - E_i + E_f$, т. е. с энергией, превышающей первоначальную¹⁾.

Связанное с плотностью заряда (7) поле не может быть интерпретировано как излучаемое атомом (подобно тому, как это было сделано в § 1), во-первых, потому, что первоначально атом находился в нормальном состоянии и не излучал, и, во-вторых, потому, что поле является комплексным.

Воспользовавшись значениями φ и \vec{a} , приведенными в § 1, и ур-ниями (3) и (4), с помощью ур-ния (29. 2) главы XIV мы получаем дифференциальное сечение для рассеяния внутри телесного угла $d\omega$

$$|f(\theta)|^2 d\omega = v_f \left| \frac{2\pi m}{h^2} \int \mathfrak{F}(\vec{r}') [-e\varphi - e\rho_1(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})] \chi_i(\vec{r}') d\tau' \right|^2 d\omega, \quad (8)$$

где

$$\mathfrak{F}(\vec{r}') = \exp(-2\pi i \vec{p}_f \cdot \vec{r}'/h), \quad (\text{Шредингер})$$

причем \vec{p}_f и v_f — импульс и скорость после столкновения. В теории Дирака [см. ур-ние (12) главы IV] \mathfrak{F} является комплексно сопряженной относительно волновой функции, которая характеризует электрон,

движущийся в направлении \vec{p}_f , которая нормирована таким образом, что на единицу объема приходится одна частица.

В нерелятивистской теории для описания столкновения между электроном и водородным атомом мы должны воспользоваться антисимметричной волновой функцией. В рассматриваемой здесь релятивистской теории для всей системы такой волновой функции не существует,

¹⁾ В случае § 1 конечного состояния с энергией $W_i - E_i + E_f$ не существует. Поэтому присутствие комплексно сопряженного члена не влияет на число выбрасываемых электронов.

однако, антисимметрия может быть учтена точно таким же образом, как это было сделано нами в § 1. Мы получили выражение $|f(\theta)|^2 d\omega$, определяющее вероятность рассеяния электрона внутри телесного угла $d\omega$. Если в выражении (7) мы заменим функцию $\psi_f(\vec{r})$ гиперболической волновой функцией, описывающей электрон, испущенный с импульсом \vec{p}_f , а в выражении (8) заменим \mathfrak{F} волновой функцией $\psi_f(\vec{r})$ электрона, попавшего в f -состояние атома, мы получим вероятность $|g(\theta)|^2 d\omega$ того, что падающий электрон поглощен при сопутствующем испускании атомного электрона. В нерелятивистской теории, принимая во внимание свойства антисимметрии волновой функций, для вероятности рассеяния внутри телесного угла $d\omega$ получаем следующее выражение:

$$\sum |f(\theta) - g(\theta)|^2 d\omega, \quad (9)$$

где суммирование производится по всем возможным начальным и конечным направлениям спина (см. § 6 главы V). Мы можем считать таким образом, что в релятивистской теории рассеяние также определяется формулой (9).

Вычислив интегралы типа (8) и произведя суммирование по всем конечным состояниям, мы можем получить формулы, определяющие задерживающую способность вещества и вероятность первичной ионизации. Следует, однако, заметить, что наиболее существенную роль в явлении первичной ионизации играют столкновения, при которых импульс падающего электрона изменяется лишь на небольшую величину. При этих условиях можно воспользоваться параметрическим методом. Виллиамс¹⁾ показал, что с помощью этого метода могут быть получены все приводимые ниже результаты, причем падающий электрон трактуется как движущийся силовой центр, а поле соответствует «классической» теории относительности. Отсюда можно заключить, что экспериментальная проверка этих формул не представляла бы собой проверки релятивистской квантовой теории взаимодействия двух электронов. Эта теория дает лишь формулы, которые не могут быть получены каким-либо другим способом при применении их к задачам, в которых падающая частица теряет большую долю своей энергии.

Соотношения, определяющие задерживающую способность и эффективное сечение, для случая ионизации имеют следующий вид в обозначениях § 3. 3 и § 4. 2 главы XI:

$$-dT/dx = 2\pi e^4 N/mv^2 \left\{ \lg \frac{2mv^2}{\alpha R h} - \lg \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - \frac{v^2}{c^2} \right\},$$

$$Q_{nl}^i = \frac{2\pi e^4}{mv^2} \frac{c_{nl} Z_{nl}}{|E_{nl}|} \left\{ \lg \frac{2mv^2}{C_{nl}} - \lg \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - \frac{v^2}{c^2} \right\}.$$

Сравнив эти выражения с соответствующими формулами (68) и (50) главы XI, мы видим, что существенное различие между этими реля-

¹⁾ Williams, Proc. Roy. Soc., 139, 163, 1933.

тивистскими формулами и формулами нерелятивистскими обусловлено наличием в релятивистских формулах члена $-\lg\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)$. В силу наличия этого члена при достаточно больших скоростях $\frac{dI'}{dx}$ и Q_{ni} имеют минимум. Для электронов, движущихся в воздухе, Бете и Ферми приводят следующие значения $\frac{dI'}{dx}$:

Начальная энергия в вольтах: 10⁵ 10⁶ 10⁷ 10⁸ 10⁹ 10¹⁰

$\frac{dI'}{dx}$ 3,67 1,69 1,95 2,47 2,99 3,48.

§ 3. Столкновение двух свободных электронов

Изложенный в § 2 метод был впервые использован Мёллером ¹⁾, применившим его к рассмотрению столкновения между двумя свободными частицами. Так как влияние одного электрона на другой можно трактовать как возмущение первого порядка, результаты в точности совпадают с результатами, получаемыми с помощью первого приближения метода Борна. Если поле меняется обратно пропорционально квадрату расстояния: $V = \pm e^2/r$, то последовательные приближения метода Борна соответствуют разложению в ряд по степеням постоянной $2\pi e^2/hv$. Релятивистская поправка представляет интерес только при $v \sim c$, формула Мёллера пренебрегает, таким образом, величиной $2\pi e^2/hc$ по сравнению с единицей. Попытка получения более точной формулы может быть осуществлена лишь в том случае, если мы примем во внимание потерю энергии при излучении, так как, если частицы движутся со скоростью, сравнимой со скоростью света, и рассеиваются на большой угол, вероятность потери энергии в форме излучения будет порядка величины $2\pi e^2/hc$.

Формула Мёллера ²⁾ для эффективного сечения, соответствующего рассеянию на углы между θ и $\theta + d\theta$, имеет следующий вид:

$$I(\theta) d\theta = 4\pi \left(\frac{e^2}{mv^2} \right) \frac{\gamma + 1}{\gamma^2} dx \left\{ \frac{4}{(1-x^2)^2} - \frac{3}{1-x^2} + \frac{(\gamma-1)^2}{4\gamma^2} \left[1 + \frac{4}{1-x^2} \right] \right\}, \quad (10)$$

где

$$x = \cos \theta^* = 2 - (\gamma + 3) \sin^2 \theta/2 + (\gamma - 1) \sin^2 \theta, \quad \gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2},$$

θ^* — угол рассеяния, отсчитываемый по отношению к системе координат, в которой центр тяжести обоих электронов находится в состоянии покоя.

Интересно отметить, что, применив метод предыдущих параграфов и воспользовавшись релятивистским волновым уравнением второго порядка, не содержащим спиновых членов, мы получим ту же формулу, не содержащую лишь члена:

$$\frac{(\gamma-1)^2}{4\gamma^2} \left[1 + \frac{4}{1-x^2} \right]. \quad (11)$$

Последний можно, таким образом, рассматривать как обусловленный наличием спина.

При малых углах формула Мёллера дает следующее значение эффективного сечения для потери энергии в интервале между Q и $Q + dQ$

$$\frac{2\pi e^4}{mv^2} \frac{dQ}{Q^2}. \quad (12)$$

Этот результат был получен еще Бором ¹⁾ в 1913 г.

Для проверки формулы (10) Чемпином ²⁾ были поставлены соответствующие опыты. Двести пятьдесят трэков β -лучей были сфотографированы в камере Вильсона, причем начальные значения $\frac{v}{c}$ лежали между 0,82 и 0,92. Как это показано ниже, согласие с теоретической формулой является вполне удовлетворительным.

Угол	Рассеяние	
	Наблюденное	По Мёллеру
30	10	13
20—30	26	30
10—20	214	230

Следует, однако, отметить, что „спиновый“ член (11) для углов, меньших 30°, играет весьма малую роль.

С другой стороны, Виллиамс показал ³⁾, что при $\frac{v}{c} \sim 0,9$ и $Q \sim 10\,000$ V потеря энергии почти в два раза превышает величину, даваемую формулой (12).

§ 4. Столкновения, сопровождающиеся излучением

При рассеянии электрона или протона ядром имеется конечная вероятность потери энергии в форме излучения. Для вычисления этой потери энергии мы должны принять во внимание взаимодействие между

¹⁾ Bohr, Phil. Mag., 25, 10, 1913; 30, 58, 1915.

²⁾ Champion, Proc. Roy. Soc. A., 137, 688, 1932.

³⁾ Ibid., 126, 289, 1929; 130, 328, 1930.

¹⁾ Möller, Zs. f. Phys., 70, 786, 1931; Ann. d. Phys., 14, 531, 1932.

²⁾ Möller, Ann. d. Phys., 14, 531, 1932; форм. (74) на стр. 568.

движущейся частицей и полем излучения. Мы воспользуемся при этом методом, аналогичным общей теории неупругого рассеяния, рассмотренной нами в главе VIII; можно было бы также воспользоваться с этой целью методом варьирования параметров, рассмотренным в главе XIV. Так как приложения этих вычислений весьма обширны, мы рассмотрим метод вычислений подробно, воспользовавшись для материальных частиц и поля излучения функцией Гамильтона, получаемой в обычной теории излучения.

§ 4.1. Нерелятивистская теория. В этом параграфе мы ограничимся рассмотрением столкновений частиц, движущихся с достаточно малыми скоростями, так что нерелятивистская теория окажется достаточно точной. Для упрощения математической стороны задачи мы предположим, что атом и излучение заключены в полном кубе большого, но конечного объема V . Число стационарных колебаний в форме плоских стоячих волн с частотами в интервале между ν и $\nu + d\nu$ равняется:

$$dN = \frac{8\pi}{c^3} V \nu^2 d\nu, \quad (13)$$

где c — скорость света. Векторный потенциал плоской стоячей волны частоты ν , имеет вид:

$$A_s(\mathbf{r}, t) = \vec{a}_s u_s(t) \sin \left\{ \frac{2\pi\nu_s}{c} (\vec{\alpha}_s \cdot \vec{r}) + \beta_s \right\}, \quad (14)$$

где \vec{a}_s — единичный вектор, характеризующий направление стоячей волны, $\vec{\alpha}_s$ — единичный вектор направления колебания электрической напряженности, так что $\vec{\alpha}_s \cdot \vec{a}_s = 0$. Зависимость u_s от времени может быть определена с помощью уравнений Гамильтона, если мы положим¹⁾

$$H_1 = \sum_s \left(\frac{1}{2} p_s^2 + 2\pi^2 \nu_s^2 q_s^2 \right), \quad (15)$$

где

$$u_s = \left(\frac{8\pi c^2}{V} \right)^{\frac{1}{2}} q_s, \quad \dot{u}_s = \left(\frac{8\pi c^2}{V} \right)^{\frac{1}{2}} p_s$$

и будем рассматривать q_s и p_s как канонические переменные. Поле светового кванта можно при этом рассматривать как распределение гармонических осцилляторов.

При наличии материальных частиц к выражению (15) должен быть добавлен оператор Гамильтона для этих частиц H_2 , а также третий член H_3 , представляющий энергию взаимодействия между частицами и полем светового кванта, выраженную в канонических переменных, входящих в H_1 и H_2 . Этот член имеет вид:

$$\sum_i \left\{ \frac{-e_i}{m_i c} (\vec{A} \cdot \vec{p}_i) + \frac{e_i^2 A^2}{2m_i c^2} \right\}, \quad (16)$$

¹⁾ См. например *Fermi, Rev. Mod. Phys.*, 4, 87, 1932.

где e_i , m_i , p_i — заряд, масса и импульс i -той материальной частицы. С помощью канонических переменных это выражение может быть преобразовано к виду:

$$H_3 = \left(\frac{8\pi}{V} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i \sum_s \left(\frac{-e_i}{m_i} \vec{a}_s \cdot \vec{p}_i q_s \sin \gamma_s \right) + \frac{4\pi}{V} \sum_i \sum_s \sum_r \left(\frac{e_i^2}{m_i} \vec{a}_s \cdot \vec{a}_r \sin \gamma_s \sin \gamma_r \right), \quad (17)$$

где $\gamma_s = \frac{2\pi\nu}{c} (\vec{\alpha}_s \cdot \vec{r}) + \beta_s$.

Волновое уравнение имеет, таким образом, вид:

$$(H_1 + H_2 + H_3 - E) \Psi = 0, \quad (18)$$

причем импульсы p играют обычную роль операторов. Невозмущенному оператору Гамильтона $H_0 = H_1 + H_2$ отвечают собственные значения энергии:

$$E_{n_s, n_1, n_2, \dots, n_s, \dots} = E_n + E_{n_1} + \dots + E_{n_s} + \dots \quad (19)$$

где s -тый осциллятор находится в n_s -том состоянии, а система материальных частиц находится в n -том состоянии. Воспользовавшись значением оператора Гамильтона H_1 , получаем:

$$E_{n_s} = h\nu_s \left(n_s + \frac{1}{2} \right). \quad (20)$$

Собственная функция, соответствующая собственному значению (19), имеет вид:

$$\Psi_{n, n_1, n_2, \dots, n_s, \dots} = \varphi_n(q) \varphi_{n_1}(q_1) \dots \varphi_{n_s}(q_s) \dots, \quad (21)$$

где функции φ_{n_s} соответствуют отдельным гармоническим осцилляторам, а φ_n описывает поведение системы материальных частиц.

§ 4.12. Излучение, испускаемое электронами. Применим уравнение (18) к рассмотрению движения электрона в силовом поле, характеризующемся потенциалом $V(\mathbf{r})$. В этом случае:

$$H_2 = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 - (E_0 + V). \quad (22)$$

Вычислим вероятность рассеяния электрона с энергией E из пучка электронов, в котором за единицу времени через единицу площади поперечного сечения проходит одна частица; предположим, что рассеяние происходит в направлении θ, φ внутри телесного угла $d\omega$ в результате передачи энергии электрона световому кванту с частотой в интервале между ν и $\nu + d\nu$, электрический вектор которого лежит внутри телесного угла $d\Omega$ в направлении (λ, μ) . Будем характеризовать эту вероятность величиной эффективного сечения:

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) d\omega d\Omega d\nu. \quad (23)$$

Вероятность рассеяния электрона внутри телесного угла $d\omega$ с энергией между $E - h\nu$ и $E - h(\nu + d\nu)$ определяется выражением:

$$d\nu d\omega \int Id\Omega = I_e(\nu, \theta) d\nu d\omega. \quad (24)$$

Выражение

$$d\nu d\Omega \int Id\omega = I_\nu(\nu, \lambda) d\nu d\Omega \quad (25)$$

дает эффективное сечение для испускания кванта с частотой между ν и $\nu + d\nu$, электрический вектор которого лежит внутри телесного угла $d\Omega$ в направлении (λ, μ) . Полное эффективное сечение для излучения кванта с частотой в интервале между ν и $\nu + d\nu$:

$$Q_{\text{взл.}}(\nu) d\nu = d\nu \int I_\nu(\nu, \lambda) d\Omega. \quad (26)$$

Для вычисления этих величин мы можем воспользоваться непосредственно формулой (32) главы XIII. При этом потенциал $V(r, r_a, r_b)$ должен

быть заменен выражением $-V(r) = \frac{h\varepsilon}{2\pi im} \left(\frac{8\pi}{V}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_s q_s \sin \gamma_s \cdot \vec{a}_s \text{ grad}$,

так как членами, соответствующими квадрату вектор-потенциала, можно пренебречь. Таким образом:

$$\psi_0(r_a) \text{ принимает вид } \varphi_{n_1}(q_1) \dots \varphi_{n_s}(q_s) \dots$$

$$\psi_n^*(r_a) \quad " \quad " \quad \varphi_{n_1}^*(q_1) \dots \varphi_{n_{s+1}}^*(q_s) \dots,$$

если мы предположим, что электрон излучает квант $h\nu_s$.

Воспользовавшись свойствами ортогональности, а также другими общими свойствами функций φ_{n_s} , мы получаем:

$$\begin{aligned} & \int V(r, r_a, r_b) \psi_0(r_a) \psi_n^*(r_a) d\tau_a = \\ & = -(n_s + 1)^{\frac{1}{2}} \frac{h\varepsilon}{2\pi im} \left(\frac{8\pi}{V}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \gamma_s \cdot \vec{a}_s \cdot \text{grad}. \end{aligned} \quad (27)$$

В нашем случае $n_1 = n_2 = \dots = n_s = 0$, так что, следуя формуле (32)

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) = \frac{4\varepsilon^2}{\pi h\nu_s V} \left| \int F_n(r', \pi - \theta) \vec{a}_s \sin \gamma_s \cdot \text{grad} F_0(r', \theta') d\tau' \right|^2, \quad (28)$$

где F_0 и F_n — решения уравнений

$$\nabla^2 F_0 + \left(k^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{00} \right) F_0 = 0,$$

$$\nabla^2 F_n + \left(k_n^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V_{nn} \right) F_n = 0,$$

нормированные, как это указано в § 3.1 главы VIII. Далее:

$$V_{00} = \int V(r, r_a, r_b) |\psi_0(r_a)|^2 d\tau_a,$$

$$V_{nn} = \int V(r, r_a, r_b) |\psi_n(r_a)|^2 d\tau_a$$

и в виду свойств функций φ_{n_s} :

$$V_{00} = V_{nn} = V(r). \quad (29)$$

Для получения общего числа электронов, рассеянных в данном интервале углов при данной величине потери энергии, мы должны умножить выражение (28) на число световых квантов с частотами в интервале между ν_s и $\nu_s + d\nu_s$, т. е. на $8\pi c^{-3} V \nu_s^2 d\nu_s$.

Это дает:

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) = \frac{32\nu_s^2 k_s}{hc^3} \frac{k_s}{k} A \left| \int F'_0(r', \pi - \theta) \vec{a}_s \sin \gamma_s \times \right. \\ \left. \times \text{grad } F'_0(r', \theta') d\tau' \right|^2 d\nu_s, \quad (30)$$

где A означает среднее по всем значениям фаз β_s , а функции $F'_0(r', \theta')$ и $F'_0(r', \theta')$ являются решениями уравнений:

$$\nabla^2 \frac{F'_0}{F'_0} + \left(\frac{k^2}{k_s^2} - \frac{8\pi^2 m}{h^2} V \right) \frac{F'_0}{F'_0} = 0, \quad (31)$$

нормированными таким образом, чтобы характеризовать плоскую волну с единичной амплитудой и соответствующую расходящуюся сферическую волну.

Прежде чем перейти к детальному рассмотрению выражения (30), мы должны исследовать сходимость содержащегося в нем интеграла. Возвращаясь к выводу формулы (32), приведенному нами в главе VIII, мы видим, что этот вопрос связан с применением методов решения неоднородных дифференциальных уравнений (см. главу VI) к уравнению (26.2). Для применимости этих методов при больших значениях r неоднородность должна стремиться к нулю быстрее, нежели r^{-2} . Для потенциала вида (27) это условие не удовлетворяется. Мы можем, однако, обеспечить сходимость интересующего нас интеграла путем введения дополнительного множителя типа $e^{-\alpha r}$ и положить затем $\alpha \rightarrow 0$. Грубо говоря, это соответствует рассмотрению материальных волн в конечной области пространства в процессе самого вычисления и последующему расширению границ этой области до бесконечности. Мы получаем при этом:

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{32\nu_s^2}{hc^3} A \left| \vec{a}_s \times \right. \\ \left. \times \int e^{-\alpha r'} F'_0(r', \pi - \theta) \sin \gamma_s \text{grad } F'_0(r', \theta') d\tau' \right|^2 d\nu_s. \quad (32)$$

При столкновениях электронов с атомами измененные γ , в области, близкой атому, мало, мы можем поэтому заменить γ , его значение в центре атома, что дает:

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{16\nu e^2}{hc^3} \Big|_{a_0}^{\rightarrow} \cdot \int e^{-\alpha r'} F_0(r', \pi - \Theta) \times \\ \times \text{grad } F_0(r', \theta') d\tau' \Big|^2 d\nu. \quad (33)$$

Так как:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int e^{-\alpha r'} F_0(r', \pi - \Theta) \text{grad } F_0(r', \theta') d\tau' = \\ = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{4\pi^2 m \nu}{h} \int r' e^{-\alpha r'} F_0(r', \pi - \Theta) \text{grad } F_0(r', \theta') d\tau',$$

мы можем также записать:

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) = \frac{256 \pi^4 m^2 \nu^3 e^2}{h^3 c^3} \Big|_{a_0}^{\rightarrow} \times \\ \times \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int r' e^{-\alpha r'} F_0(r', \pi - \Theta) F_0(r', \theta') d\tau' \Big|^2 d\nu. \quad (34)$$

Интегрирование по углам λ и μ приводит к выражению:

$$I_s(\theta, \varphi; \nu) = \frac{1024 \pi^5 m^2 \nu^3}{3h^3 c^3} \left\{ \frac{1}{2} |M_x|^2 + \frac{1}{2} |M_y|^2 + |M_z|^2 \right\} d\nu,$$

где

$$M_y^x = z^2 \Big| \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int \frac{x'}{z'} e^{-\alpha r'} F_0(r', \pi - \Theta) F_0(r', \theta') d\tau' \Big|^2. \quad (35)$$

Эта формула может быть применена к вычислению интенсивности излучения, испускаемого электронами при столкновении их с ядрами, и может быть использована для нахождения углового распределения и распределения энергии рассеянных электронов или же для характеристики спектрального распределения и поляризации испускаемого излучения. Вычисление интенсивности непрерывного излучения впервые было осуществлено Крамерсом ¹⁾ на основе старой квантовой теории и принципа соответствия; вычисления на основе квантовой механики были произведены впервые Оппенгеймером ²⁾, Сугиурой ³⁾ и Гаунтом ⁴⁾. Этими авторами был рассмотрен лишь вопрос о характере излучения; несколько позднее Мотт ⁵⁾ исследовал вопрос об интенсивности рассеянных электронов. Вычисления интенсивности излучения были вначале чрезвычайно сложны; большие упрощения были

¹⁾ *Kramers*, Phil. Mag. 46, 836, 1923.

²⁾ *Oppenheimer*, Zs. Physik 55, 725, 1929.

³⁾ *Sugiura*, Phys. Rev. 34, 858, 1929.

⁴⁾ *Gaunt*, Phil. Trans. Roy. Soc. A, 229, 163, 1930; Proc. Roy. Soc. A. 120, 654, 1930.

⁵⁾ *Mott*, Proc. Camb. Phil. Soc. 27, 255, 1931.

внесены Зоммерфельдом ¹⁾, воспользовавшимся выражением волновых функций в параболических координатах. Вычисления Зоммерфельда были затем развиты Шерцером ²⁾ и Мауэ ³⁾.

Мы приведем здесь лишь основные результаты, опуская подробности вычислений, ознакомиться с которыми читатель может на основании оригинальных работ.

§ 4. 13. Интенсивность и поляризация непрерывного излучения.

а) Излучение, испускаемое электронами.

Введем следующие обозначения:

v_1 — скорость падающего электрона,
 v_2 — скорость рассеянного электрона,
 Z — заряд рассеивающего ядра,

$$\alpha_1 = 2\pi Ze^2/hv_1, \quad \alpha_2 = 2\pi Ze^2/hv_2, \quad x = \frac{4v_1 v_2}{(v_1 + v_2)^2} \cos^2 \frac{\theta}{2}.$$

Величины M_x , M_y и M_z , входящие в выражение (35), определяются при этом следующими соотношениями:

$$|M_x|^2 = M^2 \left| i(\alpha_1 \cos \theta - \alpha_2) F(1 - i\alpha_1, 1 + i\alpha_2, 1, x) - 2\alpha_1 \alpha_2 \cos^2 \frac{\theta}{2} F(1 - i\alpha_1, 1 + i\alpha_2, 2, x) \right|^2,$$

$$|M_x|^2 = M^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \left| i\alpha_1 (1 + i\alpha_1) F(1 - i\alpha_1, 2 + i\alpha_1, 2, x) \right|^2,$$

$$|M_y|^2 = |M_x|^2 \operatorname{ctg}^2 \varphi,$$

где

$$M = \frac{v_1}{v_2} \frac{1}{16\pi^3} \frac{Z^2 e^6 v_2^2}{v^4 (v_1 + v_2)^4} \frac{h^2}{m^4} (e^{2\pi\alpha_1} - 1)^{-1} (1 - e^{-2\pi\alpha_2})^{-1}. \quad (36)$$

Подставляя эти величины в формулу (35) и интегрируя по всем θ и φ , мы получаем:

$$Q_{\text{rad}}(\nu) d\nu = \frac{32\pi^2 Z^2 e^6}{3 \sqrt{3} c^3 m^2 v^2 h\nu} g d\nu, \quad (37)$$

где

$$g = \frac{4\pi \sqrt{3} v_1^2 v_2^2}{(v_1 + v_2)^4} (e^{2\pi\alpha_1} - 1) (1 - e^{-2\pi\alpha_2}) \int_0^\pi \left\{ |m_x|^2 + |m_y|^2 \right\} \sin \theta d\theta;$$

$$m_x = \frac{1}{M} M_x, \quad m_z = \frac{1}{M} M_z, \quad (38)$$

¹⁾ Sommerfeld, Ann. der Phys. 11, 257, 1931.

²⁾ Scherzer, Ann. der Phys., 13, 137, 1932.

³⁾ Maue, Ann. der Phys., 13, 161, 1932.

тогда как деполяризация D определяется выражением:

$$D = \frac{M_x^2}{M_z^2} \quad (39)$$

Эти формулы могут быть упрощены в следующих случаях:

	g	D
I α_1 и α_2 малы (Большие скорости столкновения)		$\frac{16\pi^3 \sqrt{3} Z^2 e^4}{h^2 v_1 v_2} \log \frac{v_1 + v_2}{v_1 - v_2} (e^{2\pi\alpha_1} - 1)^{-1} (1 - e^{-2\pi\alpha_2})^{-1}$
II α_1 мало, $\alpha_2 \rightarrow \infty$, (Короткие волны)		$\frac{32\pi^3 \sqrt{3} Z^2 e^4}{h^2 v_1 v_2} (e^{2\pi\alpha_1} - 1)^{-1} \left(1 + \frac{10}{3} \alpha_1^2\right) \frac{\alpha_1^2}{3} \left(1 - \frac{1}{\alpha_2^2}\right)$
III $\alpha_1 = \rho$, $\alpha_2 \rightarrow \infty$ $\rho < 1$ (Медленные электроны)	1	$\frac{1}{4}$

Имеется, однако, весьма малое количество экспериментальных данных, пригодных для сравнения этих результатов с опытом, так как измерения интенсивностей непрерывного спектра рентгеновых лучей весьма затруднительны, особенно при условиях, близких к рассматриваемым в теоретических вычислениях. В работе Куленкампа¹⁾ и других авторов получено тем не менее достаточно хорошее согласие с теорией, — значительно лучшее, нежели с помощью классической теории. Зоммерфельду удалось повысить точность вычислений путем введения в выражение (32) члена, характеризующего запаздывание. Угловое распределение испускаемых рентгеновых лучей, вычисленное этим способом, находится в хорошем согласии с опытными данными.

б) Излучение при столкновениях медленных электронов с нейтральными атомами. Изложенная выше теория применима только для случая столкновений электронов с заряженными ионами. При рассмотрении столкновений медленных электронов с нейтральными атомами мы должны принять во внимание экранирующий эффект атомных электронов. Впервые он был учтен Недельским,²⁾ воспользовавшимся приближенным описанием атомного поля с помощью потенциала:

$$\left. \begin{aligned} V &= Ze^2/r_0 - Ze^2/r & r < r_0 \\ &= 0, & r > r_0 \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

примененного Аллисом и Морзе к рассмотрению эффекта Рамзауэра-Тоунсенда (см. гл. X, § 5). Функции F_0 и F_1 могут быть вычислены точно для потенциала этого типа, и интегрирование может быть выполнено

1) *Kulenkampff*, Ann. d. Phys., 57, 597, 1928; Phys. Zs., 30, 513, 1929; *Duane* Proc. Nat. Acad. Sci., 13, 662, 1927; 14, 450, 1928.

2) *Nedelsky*, Phys., Rev., 42, 641, 1932.

Для длин волн, сравнимых с r_0 , полная интенсивность излучения весьма сложным образом зависит от скорости электрона и быстро колеблется с изменением $\alpha_1 = \frac{2\pi Ze^2}{hv_1}$. Интенсивность излучения, испускаемого электронами данной энергии, с изменением частоты также меняется весьма сложным образом. Эти эффекты аналогичны дифракционным эффектам, наблюдающимся при упругом рассеянии медленных электронов; для детального ознакомления с этими явлениями мы отсылаем читателя к оригинальным статьям.

с) Излучение при столкновении ядер с медленными протонами. Интенсивность излучения, испускаемого при столкновениях протонов с ядрами, была исследована Шерцером. При этом для быстрых протонов были получены те же формулы, что и для случая электронов; для медленных протонов множитель g , входящий в формулу (37), имеет однако совсем иное значение. Это ясно видно из рис. 58, где g приведено как функция частоты излучения. Наличие сил отталкивания между протоном и рассеивающим ядром значительно уменьшает интенсивность излучения для медленно движущихся частиц. Наличие квадрата массы в знаменателе формулы (37) также сильно уменьшает эффект для случая протонов; вплоть до настоящего времени еще не имеется экспериментального подтверждения возможности испускания непрерывного излучения положительно заряженными частицами.

§ 4. 14. Угловое распределение рассеянных электронов. До сих пор мы занимались лишь рассмотрением вопроса об испускаемых квантах, не интересуясь распределением отклоняемых электронов. Для больших скоростей столкновений Мотт находит следующее выражение:

$$I_1(\theta, \varphi; \nu) = \frac{Ze^4}{4m^2r_1^4} \frac{2\pi e^2}{hc} \frac{16}{3\pi} \frac{d\nu}{\nu} \left(\frac{r_1}{r_2} + \frac{r_2}{r_1} - 2\cos\theta \right)^{-1}. \quad (41)$$

Оно может быть получено с помощью формулы (36), если мы будем считать α_1 и α_2 малыми. Мы видим, таким образом, что если электрон рассеивается внутри угла θ , то вероятность испускания фотона с частотой, лежащей в интервале между ν и $\nu + d\nu$, равна:

$$\frac{16}{3\pi} \frac{2\pi e^2}{hc} \frac{v_1^2}{c^2} \frac{\sin^4 \frac{\theta}{2}}{\frac{r_1}{r_2} + \frac{r_2}{r_1} - 2\cos\theta} \frac{d\nu}{\nu}$$

Угловое распределение электронов для других возможных случаев было исследовано Шерцером; полученные им результаты, содержащие весьма сложные формулы, иллюстрируются кривыми, приведенными на рис. 59. Интересно отметить, что для медленных электронов излучение обусловлено в основном электронами, отклоненными на большие углы, для быстрых же электронов имеет место обратная картина.

§ 4.2. Релятивистская теория столкновений, сопровождающихся излучением. Для рассмотрения релятивистской теории столкно-

вений, сопровождающихся излучением, мы должны воспользоваться оператором Гамильтона в форме, данной Дираком, а также ввести в рассмотрение член, характеризующий взаимодействие:

$$H_3 = ec \left(\frac{8\pi}{V} \right)^2 \sum_s q_s \sin \gamma_s \rho_1 \vec{\sigma} \cdot \vec{\alpha}_s. \quad (42)$$

В таком случае выражение (33) может быть заменено следующим:

$$\frac{64\pi^2 m^2 v^2 e^2 k_v}{h^3 c^3} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \left| \vec{\alpha} \cdot \int e^{-i\vec{r}' \cdot \vec{r}} F_v(\vec{r}', \pi - \theta) \vec{\rho}_1 \vec{\sigma} F_0(\vec{r}', \theta) d\vec{r}' \right|^2, \quad (43)$$

где электронные волновые функции представляют собой решения уравнения Дирака для потенциала V и имеют, таким образом, по четыре

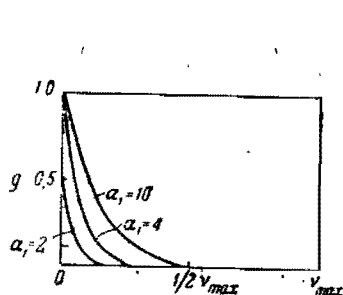


Рис. 58.

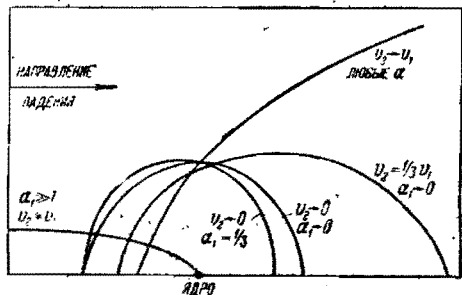


Рис. 59.

составляющих. Для сравнения этого выражения с опытными данными мы должны рассматривать неполяризованный электронный пучок, т. е. вычислять среднее значение выражения (43) для обоих начальных направлений спина. Полная вероятность каждого из начальных направлений спина равняется сумме вероятностей, соответствующих двум конечным направлениям спина.

Соответствующие вычисления до сих пор еще осуществлены не были в виду сложности функций F , входящих в выражение (43) (см. § 6 гл. IV). Гейтлером¹⁾ был однако предложен метод вычисления, в котором потенциал V учитывается в первом приближении. Процесс излучения рассматривается при этом как двойной процесс, состоящий из отклонения электрона полем V и последующего взаимодействия его с полем световых квантов, в результате которого происходит искусственные кванта. Принцип сохранения энергии для этого двойного процесса удовлетворяется, но в общем случае он может нарушаться для промежуточных стадий процесса; возмущение V может вызвать отклонение электрона, не сопровождающееся излучением, тогда как наличие H_3

¹⁾ Heitler, Zs. Physik, 84, 145, 1933.

приводит к созданию светового кванта, но не связано с отклонением электрона; оба же эти процесса, вместе взятые, подчиняются принципу сохранения энергии.

С помощью метода варьирования параметров Гейтлер получил выражение:

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) = \frac{4\pi^2 m^2 v^2 d\nu d\Omega d\omega}{h^4 c^4 \left(1 - \frac{v_1^2}{c^2}\right)} \frac{v_2}{v_1} \left| \sum \frac{H_{BI} V_{IA}}{E' - E_1} + \right. \\ \left. + \sum \frac{V_{BII} H_{IIA}}{E'' - E_2} \right|^2, \quad (44)$$

где индексы A и B относятся к начальному и конечному состояниям системы, а I и II — к промежуточным состояниям. H_{BI} представляет собой матричный элемент H_3 [см. (42)] по отношению к состояниям B и I ; V_{IA} — матричный элемент V по отношению к состояниям I и A . Суммирование производится по направлениям спина. Для различных состояний имеем:

Состояние A . Электрон со скоростью \vec{v}_1 , энергией $\frac{mc^2}{\sqrt{1 - v_1^2/c^2}} = E_1$; световой квант отсутствует.

Состояние B . Электрон со скоростью \vec{v}_2 , энергией E_2 ; световой квант $h\nu$ движется в направлении \vec{n} .

Состояние I . Электрон со скоростью \vec{v}' , энергией E' ; световой квант отсутствует.

$$\vec{v}' \left(1 - \frac{v'^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} = \vec{v}_1 \left(1 - \frac{v_1^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} + \frac{h\nu}{mc} \vec{n}.$$

Состояние II . Электрон со скоростью \vec{v}'' , энергией E'' ; световой квант $h\nu$ движется в направлении \vec{n} .

$$\vec{v}'' \left(1 - \frac{v''^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} = \vec{v}_1 \left(1 - \frac{v_1^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}} - \frac{h\nu}{mc} \vec{n}.$$

Подробное вычисление соответствующих эффективных сечений было осуществлено Гейтлером и Бете ¹⁾; так как результаты этих вычислений

¹⁾ Heitler and Bethe, Proc. Roy. Soc. A., 146, 83, 1934.

представляют значительный интерес, мы несколько остановимся на их рассмотрении. Вышеуказанными авторами было найдено, что:

$$I(\theta, \varphi; \lambda, \mu; \nu) = \frac{Z^2 e^4}{137 \cdot 4\pi^2 \nu} \frac{d\nu}{p_1} \frac{d\Omega}{|p_1 - p_2 - p|^4} \frac{d\omega}{\left\{ \begin{aligned} & \frac{p_2^2 \sin \Theta}{(E_2 - p_2 \cos \Theta)^2} (4E_1^2 - \\ & - |p_1 - p_2 - p|^2) + \frac{p_1^2 \sin^2 \lambda}{(E_1 - p_1 \cos \lambda)^2} (4E_2^2 - |p_1 - p_2 - p|^2) - \\ & - \frac{2p_1 p_2 \sin \Theta \sin \lambda \cos \theta}{(E_2 - p_2 \cos \Theta)(E_1 - p_1 \cos \lambda)} (4E_1 E_2 - |p_1 - p_2 - p|^2) + \\ & + 2p^2 (p_2^2 \sin^2 \Theta + p_1^2 \sin^2 \lambda - \\ & - 2p_1 p_2 \sin \lambda \sin \Theta \cos \theta) / (E_2 - p_2 \cos \Theta)(E_1 - p_1 \cos \lambda) \end{aligned} \right\}}, \quad (45)$$

где

$$p_{1,2} = \frac{mv_{1,2}}{\sqrt{1 - v_{1,2}^2/c^2}}; \quad p = \frac{h\nu}{c} n,$$

причем суммирование производится по направлениям поляризации испускаемого кванта и электронного спина в конечном состоянии. Проинтегрировав по всем направлениям испускания светового кванта и отклонения электрона, получаем:

$$Q_{\text{rad}}(\nu) d\nu = \frac{Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{p_2}{p_1} \frac{d\nu}{\nu} \left\{ \frac{4}{3} - 2E_1 E_2 \frac{p_2^2 + p_1^2}{p_1^2 p_2^2} + \right. \\ \left. + m^2 c^4 \left(\frac{F_1 E_2}{p_1^3} + \frac{F_2 E_1}{p_2^3} - \frac{F_1 F_2}{p_1 p_2} \right) + 2 \left[\frac{8}{3} \frac{E_1 E_2}{p_1 p_2} + \right. \right. \\ \left. + \frac{p}{p_1^3 p_2^3} (E_1^2 E_2^2 + p_1^2 p_2^2) + \frac{m^2 c^4 p}{2p_1 p_2} \left(\frac{(E_1 E_2 + p_1^2) F_1}{p_1^3} - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{(E_1 E_2 + p_2^2) F_2}{p_2^3} + \frac{2p E_1 E_2}{p_1^2 p_2^2} \right) \right] \lg \frac{E_1 E_2 + p_1 p_2 - m^2 c^4}{m c^2 p} \left. \right\}, \quad (46)$$

где

$$F_1 = \lg \frac{E_1 + p_1}{E_1 - p_1}; \quad F_2 = \lg \frac{E_2 + p_2}{E_2 - p_2}.$$

Эти выражения могут быть значительно упрощены, если $E_1 \gg mc^2$, $E_2 \gg mc^2$ и $h\nu \gg mc^2$, в этом случае:

$$Q_{\text{rad}}(\nu) d\nu = \frac{Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{d\nu}{\nu} \frac{4}{E_1^2} \left(E_1^2 + E_2^2 - \right. \\ \left. - \frac{2}{3} E_1 E_2 \right) \left(\lg \frac{2E_1 E_2}{h\nu mc^2} - \frac{1}{2} \right). \quad (47)$$

Заменяя потенциал кулонова поля статистическим атомным потенциалом модели Томаса—Ферми, мы можем учесть экранирующее действие атомных электронов на рассеивающее ядро. При этом:

$$Q_{\text{рад}}(\gamma) d\gamma = \frac{Z^2}{137} \left(\frac{Z^2}{mc^2} \right)^2 \frac{d\gamma}{\gamma} \frac{1}{E_1^2} \left[(E_1^2 + E_2^2) \left(\varphi_1(\gamma) - \frac{4}{3} \lg Z \right) - \frac{2}{3} E_1 E_2 \left(\varphi_2(\gamma) - \frac{4}{3} \lg Z \right) \right], \quad (48)$$

где $\gamma = 100 \frac{mc^2 h\nu}{E_1 E_2 Z^3}$, а φ_1, φ_2 — две функции от γ , приведенные Бете и Гейтлером в графической форме.

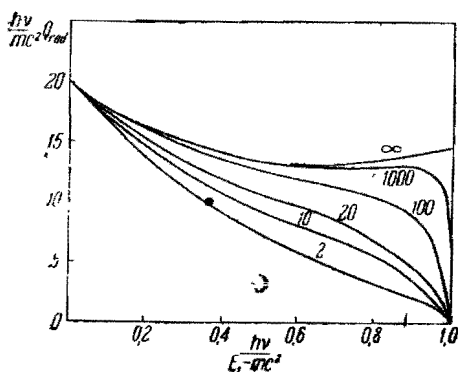


Рис. 60.

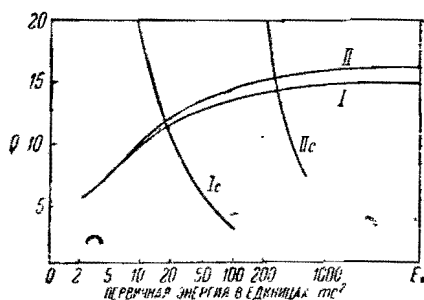


Рис. 61.

Рис. 60 иллюстрирует распределение интенсивности испускаемого излучения для электронов с различными начальными энергиями. Оно имеет тот же вид, что и в нерелятивистском случае. Значительно больший интерес представляет, как мы увидим, определение потери энергии, испытываемой вследствие излучения быстрыми электронами. Средняя энергия, излучаемая электроном с энергией E_1 на одном сантиметре пути:

$$-\left(\frac{dE_1}{dx} \right)_{\text{рад}} = N \int_0^{\gamma_{\text{max}}} h\nu Q_{\nu} d\nu, \quad (49)$$

где N — число атомов в 1 см^3 . Это выражение может быть вычислено аналитически для двух частных случаев:

(1) $E_1 \ll 137mc^2 Z^{\frac{1}{3}}$, $E_2 \gg mc^2$.

$$-\left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{рад}} = N \frac{Z^2}{137} \left(\frac{z^2}{mc^2} \right)^2 E_1 \left(4 \lg \frac{2E_1}{mc^2} - \frac{4}{3} \right).$$

$$(2) E_1 \gg 137mc^2 Z^{-1} \\ - \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{rad}} = N \frac{Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 E_1 \left(4 \lg 183 Z^{-1} + \frac{2}{9} \right). \quad (50)$$

Для промежуточных значений энергии можно произвести численное интегрирование выражения (49); получаемые при этом результаты приведены на рис. 61 как функции эффективного сечения Q_{rad} , так что

$$- \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{rad}} = N E_1 \frac{Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 Q_{\text{rad}}. \quad (51)$$

Для сравнения на чертеже приведены также значения эффективного сечения для потери энергии при столкновениях. Интересно отметить, что по мере увеличения энергии электрона потеря энергии вследствие излучения начинает превышать потерю энергии, обусловливаемую столкновениями. Это особенно очевидно из численных данных, приведенных в таблице 1. Опытные данные Андерсона¹⁾ противоречат,

Таблица 1

Потеря энергии, испытываемая быстрыми электронами в результате излучения и при столкновениях (в миллионах вольт на сантиметр пути)
Энергия электрона в миллионах вольт

Вещество	Потеря энергии	5	10	20	50	100	300	1000
H ₂ O	излучение . .	0,07	0,16	0,36	0,99	2,07	6,6	22,5
	столкновения .	1,98	2,15	2,32	2,55	2,72	2,99	3,29
Cu	излучение . .	2,1	4,9	10,9	28,9	61	191	660
	столкновения .	12,7	14,0	15,2	0,7	18,2	20,3	22,5
Pb	излучение . .	6,4	14,4	31,4	85	177	350	1900
	столкновения .	12,5	13,9	15,3	17,3	17,3	20,9	23,4

однако, этим теоретическим результатам. Так например, Андерсон нашел, что для электронов с энергией $3 \cdot 10^8$ электроно-вольт потеря энергии на сантиметр пути составляет только $3,5 \cdot 10^7$ электроно-вольт, в противоречии с теоретическим значением $5,5 \cdot 10^8$ электроно-вольт. Это расхождение не является неожиданным, если принять во внимание, что длина волны электрона с такой высокой энергией, как $3 \cdot 10^8$ электроно-вольт, меньше классического радиуса электрона $\frac{e^2}{mc^2}$. Мы имеем

здесь дело с первым случаем, когда квантовая механика в ее современной форме оказывается неприменимой для описания внеядерных явлений. В связи с этим интересно отметить, что новая электромагнитная теория Борна, принимающая во внимание электронный радиус

¹⁾ Anderson, Phys. Rev., 44, 406, 1933.

$r_0 \left(= \frac{e^2}{mc^2} \right)$, должна была бы предсказать, что заряд электрона, проявляющийся при его взаимодействии с излучением длины волны λ , должен быстро убывать с уменьшением отношения $\frac{\lambda}{r_0}$.

В настоящее время не имеется, к сожалению, опытных данных, пригодных для проверки теории Бете и Гейтлера для электронов с более низкими энергиями.

§ 5. Создание пар

В главе IV нами уже был выяснен вопрос о появлении положительных электронов в связи с рассмотрением уравнения Дирака. Они представляют собой „дырки“ в непрерывном распределении занятых состояний с отрицательной кинетической энергией и создаются при переходе отрицательного электрона из состояния с отрицательной кинетической энергией в состояние с положительной кинетической энергией, происходящем под влиянием какого-либо возмущения. Таким возмущением может явиться световой квант или материальная частица, а энергия, требуемая для создания пары, обладающей кинетической энергией E , равняется:

$$2mc^2 + E.$$

На основании общих принципов сохранения импульса легко заключить, что этот процесс возможен только при наличии третьего тела, способного забрать излишний импульс. Таким третьим телом может явиться атомное ядро; при этом пары будут образовываться вблизи ядер и силовое поле ядра будет играть весьма существенную роль в этом процессе. Мы рассмотрим здесь простейший случай — создание пар в результате воздействия светового кванта.

§ 5. 1. Создание пар световыми квантами. Создание световым квантом пары, в которой отрицательный электрон обладает энергией E_- , а положительный электрон — энергией E_+ , представляет собой процесс, обратный, в термодинамическом смысле, процессу излучения кванта с энергией $E_- + E_+$ электроном, энергия которого E_- . Это явление может быть, таким образом, рассмотрено с помощью формул, приведенных в § 4.2 и хорошо известных соотношений между эффективными сечениями для испускания и поглощения¹⁾. Если \vec{p} и E — импульс и энергия отрицательного электрона, обладающего отрицательной кинетической энергией, а $-\vec{p}$ ($=\vec{p}_+$) и $-E$ ($=E_+$) — соответствующие величины для положительного электрона, то для дифференциальных сечений, отвечающих созданию пары световым квантом $h\nu$ [причем энергия отрицательного электрона лежит в интервале между E_- и $E_- + dE_-$, а направления движения отрицательного и положительного электронов заключены внутри телесных углов $d\omega_-$ и $d\omega_+$ вблизи направлений,

¹⁾ Milne, Phil. Mag., 47, 209, 1925.

характеризуемых углами (θ_-, φ_-) и (θ_+, φ_+) по отношению к направлению падающего кванта ¹⁾] получаем:

$$\begin{aligned}
 I_c(\theta_-, \varphi_-; \theta_+, \varphi_+; E_-) dE_- d\omega_+ d\omega_- = & - \\
 & - \frac{Z^2}{137} \frac{\epsilon^4}{2\pi} \frac{p_- p_+}{p^3} |\vec{p}_- + \vec{p}_+ - \vec{p}|^{-4} \times \\
 & \times \left\{ \frac{p_+^2 \sin^2 \theta_+ (4E_-^2 - |\vec{p}_- + \vec{p}_+ - \vec{p}|^2)}{(E_+ - p_+ \cos \theta_+)^2} + \right. \\
 & + \frac{p_-^2 \sin^2 \theta_- (4E_+^2 - |\vec{p}_- + \vec{p}_+ - \vec{p}|^2)}{(E_- - p_- \cos \theta_-)^2} + \\
 & + \frac{2p_- p_+ \sin \theta_+ \cos \varphi_+ \sin \theta_-}{(E_- - p_- \cos \theta_-)^2 (E_+ - p_+ \cos \theta_+)^2} (4E_- E_+ + |\vec{p}_- + \vec{p}_+ - \vec{p}|^2) - \\
 & \left. 2p^2 (p_+^2 \sin^2 \theta_+ + p_-^2 \sin^2 \theta_- + 2p_+ p_- \sin \theta_+ \sin \theta_- \cos \varphi_+) \right\} dE_- d\omega_+ d\omega_-.
 \end{aligned}$$

Принтегрировав по всем значениям углов, мы получим эффективное сечение, соответствующее созданию положительного электрона с энергией E_+ и отрицательного электрона с энергией E_- :

$$\begin{aligned}
 Q(E_-) dE_- = & \frac{Z^2}{137} \left(\frac{\epsilon^2}{mc^2} \right)^2 \frac{p_- p_+}{p^3} dE_- \left\{ -\frac{4}{3} - 2E_- E_+ \frac{p_-^2 + p_+^2}{p_-^2 p_+^2} + \right. \\
 & + \frac{\epsilon^2}{m^2 c^4} \left(\frac{E_- E_+}{p_-^3} + \frac{E_+ E_-}{p_+^3} - \frac{E_+ E_-}{p_+ p_-} \right) + \\
 & + 2 \left[\frac{p^2}{p_-^3 p_+^3} (E_-^2 E_+^2 + p_-^2 p_+^2) - \frac{8}{3} \frac{E_- E_+}{p_- p_+} + \right. \\
 & + \frac{m^2 c^4 p}{2p_- p_+} \left(\frac{E_- E_+ - p_-^2}{p_-^3} F_- + \frac{E_- E_+ - p_+^2}{p_+^3} F_+ + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{2p E_- E_+}{p_-^2 p_+^2} \right) \right] \lg \frac{E_- E_+ + p_- p_+ + m^2 c^4}{m c^2 p} \left. \right\}, \quad (53)
 \end{aligned}$$

где

$$F_{\pm} = 2 \lg \frac{p_{\pm} + E_{\pm}}{m c^2}.$$

Эта формула симметрична относительно E_- и E_+ так как она является приближением первого порядка; однако, для больших значений энергии асимметрия всегда должна быть малой и эта формула будет давать

¹⁾ Bethe and Heitler, Proc. Roy. Soc. A., 146, 83, 1934.

достаточно хорошее приближение. При E_- и $E_+ \gg mc^2$ она значительно упрощается:

$$Q(E_-) dE_- = \frac{4Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 dE_- \frac{E_-^2 E_+^2 + \frac{2}{3} E_+ E_-}{(h\nu)^3} \left(\lg \frac{2E_- E_+}{h\nu mc^2} - \frac{1}{2} \right). \quad (54)$$

Эффект экранирования может быть учтен точно таким же образом, как и при рассмотрении явлений излучения; при этом получаем:

$$Q(E_-) dE_- = \frac{Z^2}{137} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{dE_-}{(h\nu)^3} \left[(E_-^2 + E_+^2) \left(\varphi_1(\gamma) - \frac{4}{3} \lg Z \right) + \frac{2}{3} E_- E_+ \left(\varphi_2(\gamma) - \frac{4}{3} \lg Z \right) \right],$$

где

$$\gamma = 100 mc^2 h\nu Z^{-\frac{1}{3}} / |E_- E_+|. \quad (55)$$

Распределение энергии пар иллюстрируется рис. 62. Для низких значений энергии кривые должны были бы обладать заметной асимметрией, отсутствующей на рис. 62; для больших энергий эта асимметрия очень мала. Средний угол между направлением движения пары электронов с энергией E_- и направлением движения падающего кванта — порядка $\frac{mc^2}{E_-}$, так что при больших значениях энергии электроны выбрасываются преимущественно вперед.

Полное сечение, получаемое в результате интегрирования $Q(E_-) dE_-$ по всем энергиям (E_-) отрицательного электрона, имеет следующий вид:

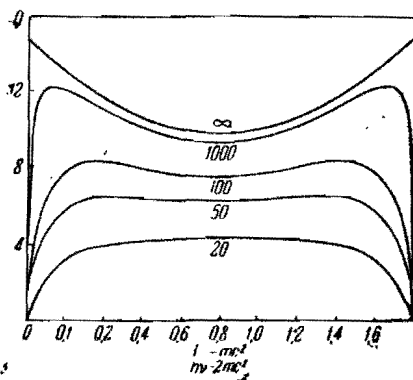


Рис. 62.

I. Если $mc^2 \ll h\nu \ll 137 mc^2 Z^{-\frac{1}{3}}$,

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{Z^2}{137} \left(\frac{28}{9} \lg \frac{2h\nu}{mc^2} - \frac{218}{27} \right).$$

II. Если $h\nu \gg 137 mc^2 Z^{-\frac{1}{3}}$,

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{Z^2}{137} \left(\frac{28}{9} \lg (183Z^{-\frac{1}{3}}) - \frac{2}{27} \right). \quad (56)$$

В остальных случаях Q может быть получено путем численного интегрирования. Оно пропорционально квадрату атомного номера и быстро возрастает с увеличением частоты кванта, как это показано на рис. 63.

Для проверки этой теории можно воспользоваться опытами, относящимися к полному поглощению γ -лучей в различных материалах. Поглощение обуславливается тремя процессами: а) эффектом Комптона

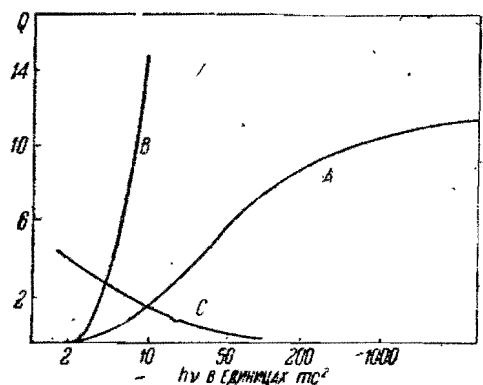


Рис. 63.

с атомными электронами, б) фотоэлектрическим эффектом и в) образованием пар. Рассеяние, обусловленное первыми двумя процессами, может быть вычислено с помощью формулы Клейна-Нишины ¹⁾ и релятивистской теории фотоэлектрического эффекта ²⁾. Остальная часть поглощения очень хорошо согласуется с величиной, вычисленной на основании приведенных выше соображений относительно образования пар.

Согласно теоретическим данным, при наличии квантов с большой энергией ($h\nu > 50mc^2$),

процесс поглощения обуславливается в основном созданием пар; неизвестно, однако, применима ли эта теория в случае квантов, обладающих столь большим значением энергии (см. § 4.2).

Рассмотренные выше вычисления являются точными только в том

случае, когда $\frac{Ze^2}{hc} \ll 1$ и скорости обоих электронов велики; эти усло-

вия удовлетворяются, однако, для большинства наиболее существенных случаев. В противном случае мы должны пользоваться точной формулой (42). Соответствующие вычисления с помощью этой формулы были произведены Нишиной, Томоногай и Сакатой ³⁾, а также Оппенгеймером и Плессетом ⁴⁾. Полученные ими результаты могут быть представлены в следующем виде:

$$I. \beta_+ \ll 1, \quad \beta_- \ll 1, \quad Ze^2/hc \ll 1.$$

$$Q_{\text{пара}} = \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{Z}{137} \right)^3 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \left[\frac{32}{3} g + \left(\frac{Z}{137} \right)^2 \left(\frac{\pi^2}{2} + 4 \right) \right] \int_0^{\sqrt{2g}} \frac{\beta_+ d\beta_+}{(e^{2\pi\gamma_+} - 1)(1 - e^{-2\pi\gamma_-})}$$

¹⁾ Klein and Nishina, Zs. f. Physik, 52, 853, 1928.

²⁾ Hall, Phys. Rev., 45, 620, 1934.

³⁾ Nishina, Tomonaga and Sakata, Sci. Papers, Inst. Phys. Chem. Research, 24, 1-5, 1934.

Oppenheimer and Plesset, Phys. Rev., 44, 53, 1933.

где

$$g = \frac{h\nu - 2mc^2}{mc^2} = \frac{\beta_+^2 + \beta_-^2}{2}, \quad \beta_{\pm} = \frac{v_{\pm}}{c}, \quad \gamma_{\pm} = 2\pi Ze^2/hv_{\pm},$$

а v — скорость рассматриваемого электрона. Наличие члена, содержащего $(e^{2\pi\gamma_+} - 1)^{-1}$, приводит к значительному уменьшению эффективного сечения; а также обуславливает резкую асимметрию распределения скоростей испускаемых позитронов. Этот член соответствует силе отталкивания между ядром и позитронами.

При условии $\beta_{\pm} \ll \frac{Ze^2}{hc}$ угловое распределение позитронов, а также отрицательных электронов является равномерным по отношению к направлению падающего кванта, однако вероятность создания пары в единице телесного угла является максимальной в том случае, когда направления обоих парных электронов совпадают или являются противоположными направлению падающего кванта. При $\beta_{\pm} \gg \frac{Ze^2}{hc}$ угловое распределение частиц каждого сорта, а также пар имеет максимум в направлении, перпендикулярном направлению падающего кванта.

II. $\beta_+ \cong 1$; $\beta_- \ll 1$; $Ze^2/hc \ll 1$.

$$Q(E_-) dE_- = \frac{4\pi mc^2}{h\nu} \left(\frac{Z}{137}\right)^2 Z \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{dE_-}{(1 - e^{-2\pi\gamma_-})}$$

Сравнивая это выражение с выражением (54), находим, что при данном значении $h\nu$ процесс, при котором обе частицы обладают большой энергией, является более вероятным, нежели процесс, при котором положительный электрон обладает большой скоростью, а отрицательный электрон — малой скоростью; соотношение между вероятностями этих процессов:

$$\frac{137}{3\pi Z} \left(2 \lg \frac{h\nu}{2mc^2} - 1\right).$$

Позитроны при этом движутся преимущественно вперед, а отрицательные электроны обладают равномерным угловым распределением.

III. $\beta_+ \ll 1$, $\beta_- \cong 1$, $Ze^2/hc \gg 1$.

$$Q(E_+) dE_+ = 4\pi \left(\frac{mc^2}{h\nu}\right) \left(\frac{Z}{137}\right)^2 Z \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{dE_+}{(e^{2\pi\gamma_+} - 1)}$$

Это выражение значительно меньше, нежели в случае II в виду наличия сил отталкивания между ядром и позитроном.

§ 5.2. Создание пар материальными частицами. Теоретическое рассмотрение вопроса о создании пар материальными частицами усложняется тем обстоятельством, что создающая частица может передавать при этом процессе любую часть своей первоначальной энергии, тогда как в предыдущем случае при создании пары световым квантом по-

следний передавал всю свою энергию. Гейтлер и Нордгейм¹⁾ развили метод рассмотрения этой задачи, аналогичный методу Гейтлера, примененному в § 4.2 при рассмотрении испускания излучения и создания пар световым квантом. Этот метод был применен вышеупомянутыми авторами к вычислению эффективного сечения для создания пар тяжелыми частицами; получается результат:

$$\sigma_{\text{пара}} = \left(\frac{1}{137} \right)^2 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{m^2 Z_1^4 Z_2^2}{M_1 (E_1 - M_1 c^2)} \left(1 - \frac{M_1}{Z_1} \frac{Z_2}{M_2} \right)^2,$$

где M_1 и M_2 — покоящиеся массы сталкивающихся частиц. Частица 1 представляет собой падающую частицу, ее полная энергия равна E_1 ; $Z_1 e$ и $Z_2 e$ — заряды обоих ядер. Это выражение приводит к очень малым значениям эффективного сечения для создания пар при столкновениях между любыми ядрами, откуда следует, что эти процессы не играют существенной роли.

Второй возможный подход — рассмотрение создания пар как неупругого столкновения падающей частицы с системой, состоящей из ядра и электронов, обладающих отрицательной кинетической энергией, причем электрон переходит из состояния с отрицательной в состояние с положительной кинетической энергией. При рассмотрении создания пар электронами мы можем воспользоваться формулой (8), где скалярный и векторный

→ потенциалы φ и \mathbf{a} определяются с помощью значений тока и плотности, соответствующих переходам из состояний с отрицательной в состояния с положительной кинетической энергией. При этом запаздывание учитывается в том же приближении, что и остальные величины; можно также ввести в рассмотрение эффект электронного обмена, подобно тому как это было указано в § 2. Подробные вычисления очень сложны; в настоящее время эта задача еще не решена полностью²⁾.

§ 6. Аннигиляция положительных электронов

Положительный электрон представляет собой вакантное состояние или „дырку“ в непрерывном распределении электронов, обладающих отрицательной кинетической энергией; имеется поэтому конечная вероятность заполнения дырки электроном в результате столкновения. Подобного рода процесс приводит к аннигиляции как положительного, так и отрицательного электронов, с которым происходит столкновение. При этом имеются следующие возможности отдачи избытка энергии:

а) Путем излучения.

1. Испускание двух квантов.

Переход электрона между двумя состояниями свободного движения может иметь место только при одновременном испускании двух квантов, так как только в этом случае может удовлетвориться закон сохранения импульса.

¹⁾ Heitler und Nordheim, J. de Phys., 7, 449, 1934.

²⁾ См. Furry and Carlson, Phys. Rev., 44, 237, 1933; Landau und Lifshitz, Phys. Zs. der Sowjetunion, 6, 244, 1934.

2. Испускание одного кванта.

Если столкновение отрицательного и положительного электронов происходит вблизи ядра, последнее может забрать избыточный импульс и процесс аннигиляции может, таким образом, произойти, сопровождаясь излучением одного кванта.

б) Эффект Оже.

В этом случае избыток энергии забирается вторым отрицательным электроном. Может иметь место, таким образом, одновременная аннигиляция положительного электрона и атомного *K*-электрона, при которой избыток энергии переходит ко второму *K*-электрону, в результате чего последний вылетает из атома с большой положительной кинетической энергией. Этот процесс совершенно аналогичен, таким образом, эффекту Оже.

Первый из этих трех процессов является наиболее существенным, вероятность его была впервые вычислена Дираком ¹⁾ и Оппенгеймером ²⁾. Если *E* — энергия позитрона в единицах *mc*², то эффективное сечение для аннигиляции, сопровождающейся излучением двух квантов, равно:

$$\frac{\pi e^4 Z}{m^2 c^3 v} \frac{1}{E(E+1)} \left[\frac{E^2 + 4E + 1}{(E^2 - 1)^2} \lg \left\{ E + (E^2 - 1)^{\frac{1}{2}} \right\} - (E + 3) \right],$$

где *e* — заряд ядра. Это приводит к следующим значениям средней длины свободного пути в воде:

Таблица II

Длина свободного пути при аннигиляции и эффективный пробег положительного электрона
Энергия в миллионах вольт

	200	100	50	20	10	5	2	1	0,1
Длина своб. пути в см	8	471	270	133	78,8	47,6	25,9	17,5	7,2
Эффект. пробег в см	52	28	16	7,7	4,3	2,2	0,9	0,45	0,05

Вероятность аннигиляции положительного электрона при уменьшении энергии от 2×10^8 вольт до 10^5 вольт составляет, таким образом, примерно 0,36.

Строгое доказательство возможности подобного рода процесса дается опытами Тарранта и Грэй ³⁾, а также опытами Штагеля и Кетелаара ⁴⁾ по изучению аномального поглощения γ -лучей ядрами. В этих опытах было найдено, что излучение, соответствующее кванту с энергией 5×10^5 электроно-вольт испускается всеми веществами после процесса погло-

¹⁾ Dirac, Proc. Camb. Phil. Soc., 26, 361, 1930.

²⁾ Oppenheimer, Phys. Rev., 35, 939, 1930.

³⁾ Tarrant and Gray, Proc. Roy. Soc. A., 136, 662, 1932 и 143, 681, 1934.

⁴⁾ Stahel and Ketelaar, C. R. Acad. Sci. Paris, 196, 1664, 1933.

щения γ -лучей. Эта энергия как раз и представляет собой энергию каждого из квантов, излучаемых при аннигиляции положительного электрона с малой кинетической энергией, имеющей место при создании пар γ -лучами в поле ядра.

Второй из вышеупомянутых трех процессов был впервые рассмотрен Ферми и Уленбеком ¹⁾ (в нерелятивистском приближении) и несколько позднее Бабой и Хульмом ²⁾ с помощью метода, применимого для быстрых позитронов ³⁾. Этот метод представляет собой интересное развитие интерпретации положительного электрона, как незанятого состояния с отрицательной кинетической энергией. Вероятность спонтанного перехода электрона в состояние с данной отрицательной энергией вычислялась при этом сначала в предположении, что все эти состояния являются незаполненными. В действительности только некоторая доля этих состояний является незаполненной (те из них, которые соответствуют позитронам), так что это значение вероятности должно быть умножено на отношение числа действительно свободных состояний с отрицательной энергией (число это определяется интенсивностью пучка позитронов) к общему числу таких состояний. Получаемый при этом результат дает искомую вероятность излучения.

Для атома с ядерным зарядом Ze эффективное сечение для аннигиляции, обусловленной двумя K -электронами равно:

$$\frac{h^2 e^2}{m^2 c^3} \left(\frac{2\pi e^2}{hc} \right)^5 Z^6 \frac{\beta \gamma^2}{(1+\gamma)^3} \left[-\frac{4}{3} + \frac{1+2\gamma}{\gamma(1-\gamma)} \left\{ 1 + \frac{\gamma^2}{2\beta} \lg \frac{\gamma^2}{(1+\beta)^2} \right\} \right],$$

где $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$, $\beta = v/c$, а v — скорость позитронов. Эта формула применима только при $\beta > 0,8$. Это эффективное сечение значительно меньше эффективного сечения, соответствующего первому процессу, даже в случае более тяжелых ядер. Для свинца процесс аннигиляции, сопровождающейся излучением двух квантов, оказывается в 20 раз более эффективным, для кислорода — в 10^6 раз (для позитронов, энергии которых превышают $2mc^2$).

Процесс аннигиляции, сходный с эффектом Оже, был рассмотрен с теоретической точки зрения Брунингсом ⁴⁾. В этом случае может быть применена непосредственно формула (6) § 1, если мы будем рассма-

тривать потенциалы φ и a , как соответствующие переходам атомного электрона из K -уровня на свободный уровень с отрицательной кинетической энергией, обнаруживающийся в виде падающего позитрона. Вычисления показывают, что вероятность этого процесса является максимальной в том случае, когда энергия позитрона близка к энергии связи K -электрона; в этом случае она оказывается одного порядка величины с вероятностью второго из рассмотренных нами трех возможных процессов аннигиляции.

¹⁾ *Fermi and Uhlenbeck, Phys. Rev., 44, 510, 1930.*

²⁾ *Bahba and Hulme, Proc. Roy. Soc. A., 146, 723, 1934.*

³⁾ См. также *Nishina, Tomonaga and Tamaki, Sci. Pap. Inst. Phys. Chem. Res., Tokyo, 24, 4—12, 1934.*

⁴⁾ *Brunings, Physica, 1, 996, 1934.*

ГЛАВА XVI

ЯДЕРНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ

В главе XV нами был рассмотрен один из возможных типов столкновений, при которых взаимодействующие частицы обладают большой кинетической энергией, — именно тот случай, когда одна из сталкивающихся частиц представляет собой быстрый электрон. Существенной чертой теории таких столкновений является применение релятивистской квантовой механики в той ее форме, в которой она существует в настоящее время. Мы перейдем теперь к рассмотрению столкновений между атомными ядрами, движущимися с большой энергией. Благодаря большой массе ядер такое движение не должно быть непременно связано с большими скоростями, так что релятивистские соображения не являются в этом случае существенными. При этом должно быть введено в рассмотрение новое обстоятельство — природа энергии взаимодействия между рассматриваемыми частицами. В настоящее время не существует теоретических представлений, на основании которых можно было бы вычислить эти силы взаимодействия; наша задача будет заключаться в получении сведений об их природе на основании экспериментальных данных о процессах столкновения. Прежде чем перейти к рассмотрению этих данных, мы остановимся вкратце на существующих типах экспериментов, относящихся к кругу интересующих нас вопросов.

§ 1. Экспериментальные методы и результаты

§ 1. 1. Опыты, при которых наблюдаются упругие столкновения ядер. Эти опыты, заключающиеся в определении интенсивности рассеяния пучка одинаковых ядер другими ядрами (в газообразном состоянии или в тонких пленках), могут дать ценные сведения по интересующим нас вопросам; однако, вплоть до настоящего времени они ограничивались изучением рассеяния α -частиц ¹⁾ и нейтронов ²⁾ (в послед-

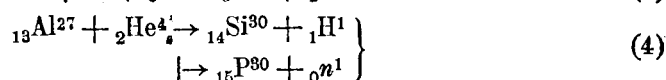
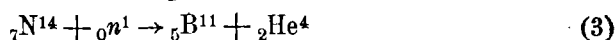
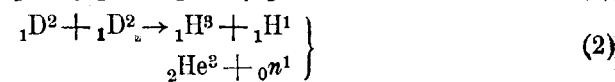
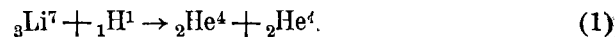
¹⁾ В водороде — *Rutherford (Phil. Mag., 37, 537, 1919), Chadwick and Bieler (Phil. Mag., 42, 923, 1921)*. В тяжелом водороде: *Rutherford and Kempton (Proc. Roy. Soc. A., 143, 724, 1934)*. В гелии — *Rutherford and Chadwick (Phil. Mag., 4, 605, 1927), Chadwick (Proc. Roy. Soc. A., 123, 114, 1930), Wright (Proc. Roy. Soc. A., 137, 677, 1932)*. С другими легкими ядрами — *Bieler (Proc. Roy. Soc. A., 105, 434, 1924), Chadwick (Phil. Mag., 50, 889, 1925), Reitzler (Proc. Roy. Soc. A., 124, 154, 1931)*.

²⁾ *Meitner and Philipp, Naturwiss., 20, 929, 1932, ZS. f. Phys., 87, 484, 1934; Chadwick, Proc. Roy. Soc. A., 142, 1, 1933; Bonner, Phys. Rev., 44, 463, 1934; Kurie, Phys. Rev., 44, 461, 1933; Monod-Herszen, J. Phys. Rad., Feb. 1934.*

нем случае наблюдаются лишь отброшенные нейтронами ядра) весьма ограниченном числом легких ядер. Наиболее интересные результаты могли бы быть получены при изучении рассеяния протонов, а также диплонов (дейтонов), однако практически подобного рода опыты до сих пор осуществлены не были, хотя экспериментальная техника находится на достаточно высоком уровне развития, чтобы сделать их осуществимыми.

§ 1. 2. Расщепление ядер и их возбуждение. В опытах этого типа при столкновении наблюдается расщепление ядер. При этом может иметь место:

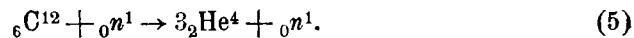
а) расщепление ядра, связанное с захватом падающей частицы ¹). В этом случае при столкновении имеет место перераспределение частиц; подобного рода столкновения могут быть отнесены к общему случаю столкновений с перераспределением, рассмотренных нами в главе VIII. Типичными примерами могут служить реакции.



В опытах этого рода применялись весьма разнообразные ядра; большая ценность их заключается в обнаружении и исследовании доселе неизвестных ядер. Так, например, реакция (2) приводит к открытию новых изотопов водорода и гелия. Самый факт существования и стабильности этих легких ядер является весьма существенным для построения теории взаимодействия ядер.

В некоторых случаях ядра, получающиеся в результате преобразования, оказываются нестойкими и могут распадаться подобно естественным радиоактивным элементам. Такая искусственная радиоактивность впервые была обнаружена супругами Жюлио ²) при изучении бомбардировки ядер α -частицами; последующие опыты Ферми ³) и его сотрудников показали, что это явление наблюдается для очень многих элементов при бомбардировке их нейтронами.

б) Расщепление ядер, не связанное с захватом частиц. В этих случаях мы имеем дело с процессами, сходными с ионизацией атомов электронами. Подобного рода процессы до сих пор наблюдаются не были, хотя имеются некоторые указания на существование реакции ⁴):



¹) См. Chadwick, Feather, Cockcroft, Oliphant, Intern. conf. on Physics, London, October 1934.

²) Joliot, Comptes Rendus. Acad. Sci. Paris, 193, 254, 1934.

³) Fermi, Proc. Roy. Soc. A., 146, 483, 1934.

⁴) Chadwick, Feather and Davies, Proc. Camb. Phil. Soc., 30, 357, 1934.

с) Возбуждение ядер. Этот тип столкновений аналогичен типу б), с той лишь разницей, что ядро не „ионизируется“, а возбуждается. После столкновения избыток энергии возбужденного ядра излучается в виде γ -лучей. Косвенные указания на возбуждение некоторых ядер нейтронами были получены Ли ¹); α -частицы являются в этом отношении значительно менее эффективными. Возбуждение ядра лития, переходящего в состояние, которое лежит выше нормального на 6×10^6 эл.-вольт, происходит, однако, достаточно часто при столкновении его с α -частицами; имеются также некоторые указания на подобного рода возбуждение ядер азота, фтора и алюминия.

§ 1. 3. Столкновения, связанные с излучением. Сюда относятся все явления, связанные с непосредственным взаимодействием ядер с полем световых квантов. Наиболее определенные экспериментальные результаты в этом направлении относятся к расщеплению ядер γ -лучами, с испусканием нейтронов. Реакция этого типа:



впервые была обнаружена Чадвиком и Гольдгабером ²).

Имеются также экспериментальные указания на большую вероятность обратных процессов — соединения ядер, сопровождающегося излучением; однако, как мы увидим в дальнейшем, с теоретической точки зрения этот процесс весьма мало вероятен.

Перейдем теперь к теоретическому обсуждению этих явлений. При этом окажется удобным рассматривать отдельно столкновения с участием нейтронов, так как характер их взаимодействия с ядрами, благодаря отсутствию у них заряда, существенно отличен от взаимодействия заряженных ядер друг с другом.

§ 2. Столкновения с участием нейтронов

Существование изотопов свидетельствует о том, что между нейтронами и ядрами должны существовать силы притяжения; нет никаких оснований ожидать, что эти силы могут менять свой знак (за исключением случая очень малых расстояний, что соответствует возможной неполной проницаемости ядерных частиц). Мы можем поэтому ожидать наличия полной аналогии между столкновениями нейтронов с ядрами и столкновениями электронов с атомами. Рассмотрим сперва случай упругих столкновений.

§ 2. 1. Упругие столкновения между нейтронами и ядрами. При учете аналогии этих явлений со столкновениями электронов с атомами сразу же возникает вопрос: можно ли в этом случае ожидать наличия эффекта аналогичного эффекту Рамзауера-Таунсенда, рассмотренному нами в главе X.

Для того чтобы эффект Рамзауера-Таунсенда мог быть наблюден, необходимо прежде всего, чтобы длина волны, соответствующая отно-

¹) Lea, Proc. Roy. Soc. A., 150, 637, 1935.

²) Chadwick and Goldhaber, Nature, 134, 273, 1934.

сительному движению сталкивающихся частиц, была одного порядка величины с эффективным радиусом сил их взаимодействия. Это условие обычно удовлетворяется для нейтронов, применяющихся при экспериментальных исследованиях. Скорости их достигают 3×10^9 см/сек, так что при столкновениях с тяжелыми ядрами длина волны, соответствующая относительному движению, имеет порядок 10^{-12} см, т. е. сравнима с радиусом ядра (около 8×10^{-13} см для тяжелых элементов). Второе условие заключается в том, чтобы энергия взаимодействия была достаточно велика. Если взаимодействие оказывается достаточно интенсивным, чтобы обусловить для нейтронов существование нескольких устойчивых состояний с отрицательной энергией (что соответствует нескольким изотопам), можно считать, что это второе условие также выполняется. Перечень изотопов тяжелых ядер показывает, что мы должны были бы ожидать наличия эффекта Рамзауера-Таунсенда при упругом рассеянии нейтронов подобными ядрами. Следует, однако, иметь в виду, что силы взаимодействия между ядерными частицами могут быть совершенно иной природы, чем внеядерные силы; в первом случае мы можем иметь дело, например, не с парным, а с тройным взаимодействием, или силами, зависящими от относительных скоростей. Существование таких сил уничтожило бы какую бы то ни было аналогию ядерных столкновений с внеядерными явлениями, так что если бы подобная аналогия была обнаружена, мы имели бы некоторые указания относительно характера внутриядерных сил.

Экспериментальные данные, относящиеся к зависимости эффективного сечения для упругих столкновений нейтронов с ядрами от скорости нейтронов, являются в настоящее время весьма скудными и неточными. Это обстоятельство в значительной степени обусловлено неоднородностью скоростей применяющихся нейтронов, оно могло бы быть устранено путем применения нейтронов, получающихся при искусственном расщеплении ядер. Имеются уже, однако, некоторые указания на то, что эффективное сечение для упругих столкновений нейтронов с ядрами свинца возрастает с возрастанием скорости нейтронов¹⁾.

Значительно более определенные теоретические заключения могут быть сделаны в результате изучения столкновений нейтронов с наиболее легкими ядрами: протонами, диллонами и ядрами гелия.

§ 2. Столкновения нейтронов с протонами, диллонами и ядрами гелия. Для получения более определенных результатов мы должны прежде всего выбрать какой-нибудь простой закон для энергии взаимодействия, характеризующий, тем не менее, основные черты этого взаимодействия. Положим, например,

$$V(r) = \begin{cases} -C, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (7)$$

1) Bonner, Phys. Rev., 44, 463, 1934.

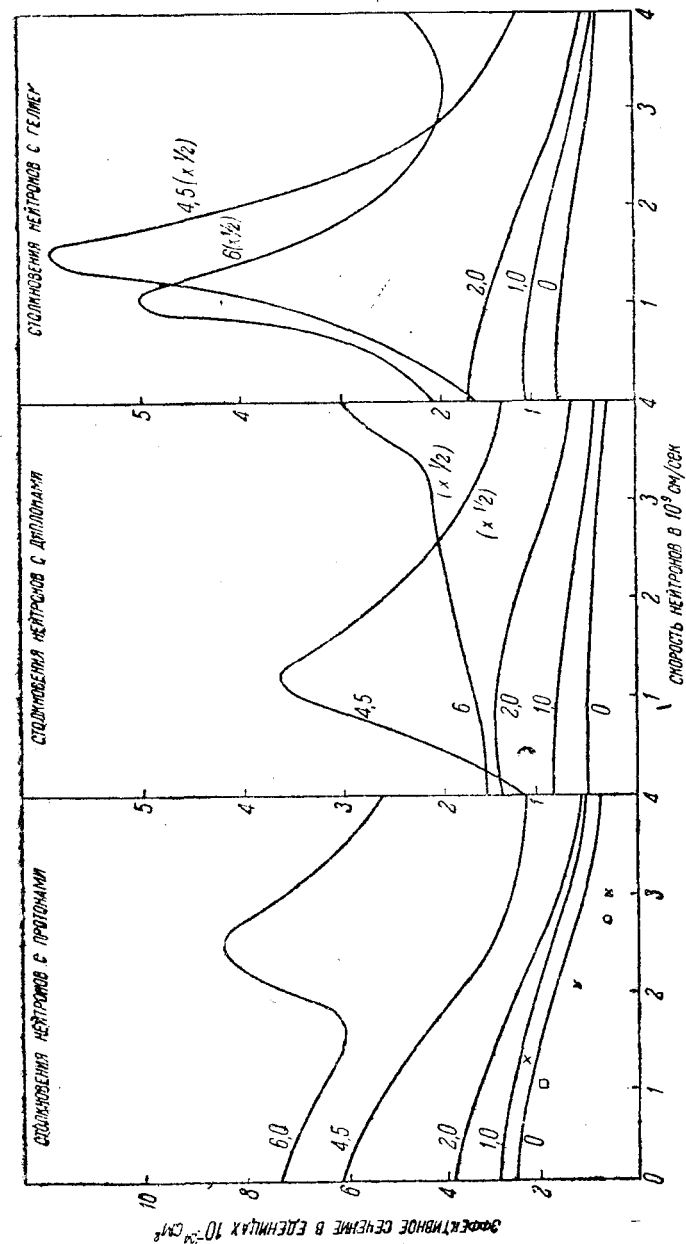


Рис. 64.

Энергия этого вида определяется двумя параметрами: C и a ; мы можем однако найти соотношение между этими параметрами, воспользовавшись известными значениями энергий связи ядер — ${}^1_1\text{D}^2$, ${}^2_1\text{H}^3$ и ${}^2_2\text{He}^5$,

получающихся в результате соединения нейтронов с соответствующими более легкими ядрами. Если энергию связи обозначить через E_0 , то

$$\operatorname{tg} \lambda a = - \sqrt{\frac{C}{E_0}}, \quad (8)$$

где $\lambda = \left[\frac{8\pi^2 M^*}{h^2} (E_0 + C) \right]^{\frac{1}{2}}$, а M^* — приведенная масса нейтрона и ядра, с которым он сталкивается.

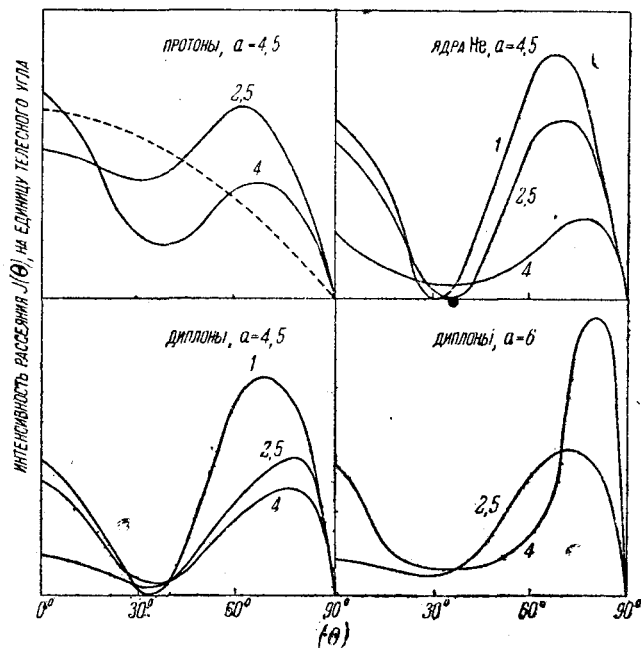


Рис. 65.

Рассеяние в силовом поле, потенциальная энергия которого имеет вид (7), было уже изучено нами в главе II для предельного случая очень длинных волн, когда существенную роль играет только фаза нулевого порядка. Применявшийся при этом метод легко может быть обобщен, что дает:

$$\tau_m = \operatorname{arctg} \left\{ \frac{(-1)^n k J_{n-\frac{1}{2}}(ka) J_{n+\frac{1}{2}}(k'a) - k' J_{n-\frac{1}{2}}(k'a) J_{n+\frac{1}{2}}(ka)}{k J_{-n+\frac{1}{2}}(ka) J_{n+\frac{1}{2}}(k'a) + k' J_{n-\frac{1}{2}}(k'a) J_{-n-\frac{1}{2}}(ka)} \right\}, \quad (9)$$

где

$$k = 2\pi M^* v / h, \quad k' = \left\{ \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} \left(\frac{1}{2} M^* v^2 + C \right) \right\}^{\frac{1}{2}},$$

а v — скорость падающих нейтронов. Подставляя эти величины в формулы (17) и (18) главы II, получаем значения дифференциального и полного эффективных сечений $J(\theta)$ и $Q(v)$.

Так как величина a остается неопределенной, мы приводим на рис. 64 значения эффективных сечений, вычисленные для столкновений нейтронов с тремя рассматриваемыми легкими ядрами для различных значений a , а на рис. 65 — некоторые кривые, характеризующие угловое распределение отброшенных ядер. В последнем случае распределение определяется не в относительных координатах, а в той системе, где отброшенное ядро находилось первоначально в состоянии покоя. Это распределение отброшенных ядер относится к единице телесного угла, т. е. является распределением, изучаемым обычно экспериментально. Если $I(\theta)$ — интенсивность рассеяния на единицу телесного угла в относительных координатах, то число отброшенных ядер, приходящееся на единицу телесного угла, определяется выражением:

$$J(\theta) = 2I(\pi - 2\theta) \cos \theta, \quad (10)$$

где θ — угол между направлением отбрасываемого ядра и направлением падающих нейтронов.

Для значений a , превышающих 3×10^{-13} см, во всех трех случаях должен был бы наблюдаться эффект Рамзауера-Гаунсенда. Последний должен был бы сопровождаться сильным изменением углового распределения отбрасываемых ядер с изменением скорости нейтронов. В настоящее время имеется достаточное количество экспериментальных данных о характере распределения отброшенных протонов; все они свидетельствуют о том, что $J(\theta)$ пропорционально $\cos \theta$. $I(\theta)$ должно быть поэтому постоянным, так что при рассматриваемых столкновениях только фаза η_0 может играть существенную роль. Отсюда следует, что параметр a должен быть значительно меньше длины волны, соответствующей относительному движению нейтрона и ядра; из рис. 65 следует, что a должно быть меньше 3×10^{-13} см. Возвращаясь к рис. 64, мы видим далее, что для таких значений a при столкновениях нейтронов с протонами эффект Рамзауера наблюдается не должен. Действительно, в случае достаточной малости a по сравнению с длиной волны, эффективное сечение для столкновения нейтронов с протонами достаточно точно определяется выражением:

$$Q = \frac{4\pi}{\lambda^2 + k^2}, \quad (11)$$

где λ определяется формулой (8). Этот результат может быть получен путем сравнения значения фазы:

$$\eta_0 = \operatorname{arctg} \left(\frac{k}{k'} \operatorname{tg} k'a \right) - ka \quad (12)$$

с условием (8) существования энергетического уровня E_0 , что впервые было указано Вигнером¹⁾.

1) Wigner, Z. Physik, 83, 253, 1933.

Экспериментальные данные о зависимости Q от скорости для рассматриваемого нами типа столкновений являются, как это уже было указано, весьма скудными. Все наблюдаемые величины, полученные вплоть до даты написания этой книги, приведены на рис. 64. Хотя скудость экспериментального материала и затрудняет сравнение его с теорией, следует отметить, что теория приводит к значительно менее быстрому изменению Q с изменением скорости, нежели это наблюдается экспериментально; она дает также чересчур большое значение эффективного сечения. При отыскании возможных объяснений этих расхождений (если таковые имеются в действительности), мы должны привлечь во внимание возможность существования нескольких способов взаимодействия между нейтроном и атомным ядром (сравним со случаем взаимодействия водородного атома с водородным ионом). Только один из них должен оказаться существенным при определении энергии связи ядерных изотопов, но все они должны быть учтены при выяснении природы столкновений.

В настоящее время ничего еще нельзя сказать о применимости этих теоретических представлений к случаям столкновений нейтронов с диплонами и ядрами гелия; ясно, однако, что экспериментальные исследования могли бы дать весьма ценные сведения о характере взаимодействия нейтронов с легкими ядрами.

В предыдущем мы молчаливо предполагали, что взаимная потенциальная энергия нейтронов и протонов очень быстро убывает с увеличением расстояния между ними. Это обстоятельство является весьма сомнительным, так как имеется весьма значительная априорная вероятность того, что нейтрон будет вести себя подобно диполю, т. е. потенциальная энергия взаимодействия при больших r будет убывать обратно пропорционально r^2 . Потенциал такого типа во многих отношениях представляет собой предельный случай. Мы показали, например, что эффективное сечение для рассеяния в потенциальном поле является конечным только в том случае, когда при больших r потенциал убывает быстрее, нежели r^{-2} . С другой стороны, поле сил притяжения обладает бесконечным числом отрицательных энергетических уровней, если потенциал не удовлетворяет этому условию. На основании этих соображений легко придумать экспериментальный критерий, исключающий из рассмотрения дипольное поле. Функция углового распределения $I(\theta)$ для такого поля определяется выражением:

$$I(\theta) = c \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2},$$

для малых θ имеем:

$$J(\theta) = 2I(\pi - 2\theta) \cos \theta = 2c \sec \theta \quad \text{при } \theta = \frac{\pi}{2}. \quad (13)$$

Таким образом, при $\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}$ $J(\theta)$ будет стремиться к бесконечности, тогда как экспериментально наблюдаемая интенсивность стре-

мится в этом случае к нулю. Мы были правы поэтому, предполагая, что энергия взаимодействия убывает быстрее, нежели r^{-2} . Все поля такого типа ведут себя аналогичным образом; потенциал, убывающий обратно пропорционально квадрату расстояния, является их частным случаем. Взаимодействие было нами охарактеризовано простейшей формой (7) потенциала этого типа. Следует, однако, помнить, что мы доказали лишь, что эффективное сферически-симметричное поле может быть охарактеризовано потенциалом такого типа. Этим не исключается возможность описания нейтрона как очень быстро вращающегося диполя, так как в этом случае среднее внешнее поле также будет обладать сферической симметрией и будет вести себя аналогичным образом.

§ 2. 3. Неупругие столкновения нейтронов с ядрами. О неупругих столкновениях нейтронов с ядрами мы не можем сделать почти никаких заключений с теоретической точки зрения; можно лишь предположить, что в общих чертах они должны быть сходными с неупругими столкновениями электронов с атомами. Можно ожидать, однако, также и наличия некоторых отличительных свойств, являющихся следствием быстрого убывания взаимодействия между нейтроном и ядром (в отличие от медленного изменения взаимодействия, характерного для Кулонова поля сил). За отсутствием достаточного экспериментального материала о возбуждении ядер нейтронами мы не будем останавливаться здесь на дальнейшем рассмотрении этого вопроса.

§ 2. 4. Столкновения нейтронов с электронами. Если энергия взаимодействия нейтрона с электроном того же порядка величины, что и энергия взаимодействия между нейтроном и протоном, то эффективное сечение для такого рода столкновений будет чрезвычайно мало, так как длина волны, соответствующая столкновениям нейтронов с электронами, очень велика (10^{-9} см); к рассмотрению этих вопросов может быть поэтому применена формула Борна. Применимость последней в данному случае легко может быть подтверждена с помощью критерия, рассмотренного нами в главе VII¹⁾. Мы получаем при этом эффективное сечение порядка 10^{-34} см², что соответствует созданию одного иона на 10^{10} см пути в воздухе при нормальных условиях. Эта малая ионизирующая способность является характерной чертой прохождения нейтронов через материю. При изучении расщепления ядер нейтронами в камере Вильсона траектория нейтрона между его источником и местом столкновения никогда не наблюдается; Ди²⁾ не удалось найти каких-либо следов столкновений нейтронов с электронами с помощью метода камеры Вильсона, позволившего обнаружить образование одного иона на 300 см пути. Обнаружение нейтронов возможно таким образом только по ионизации, производимой выбрасываемыми ядрами, которым они сообщают значительную кинетическую энергию.

¹⁾ Massey, Proc. Roy. Soc. A, 133, 460, 1932.

²⁾ Dee, Proc. Roy. Soc. A., 136, 727, 1932.

Существование нейтральных частиц, масса которых равна или меньше массы электрона, невозможно обнаружить при прохождении их через материю. Действительно, эффективные сечения для столкновений подобных частиц с электронами были бы одного порядка с сечениями для тяжелых нейтронов, в то время как частицы были бы неспособны передавать кинетическую энергию тяжелым ядрам в силу своей малой массы. „Нейтрино“ теории Ферми¹⁾ представляет собой именно такую частицу; получение экспериментального подтверждения его существования является поэтому чрезвычайно затруднительным.

§ 2. 5. Столкновения с участием нейтронов, сопровождающиеся излучением. Рассмотрению подлежат следующие возможности:

а) Соединение нейтрона с ядром при столкновении, сопровождающемся излучением избытка энергии.

б) Процесс, обратный а) — расщепление ядра γ -лучами с испусканием нейтронов.

в) Ускорение ядер в результате взаимодействия их с нейтронами, сопровождающееся излучением, аналогичным непрерывному спектру рентгеновых лучей.

Процессы а) и б) могут быть рассматриваемы совместно, так как вероятности их связаны друг с другом термодинамическим соотношением²⁾

$$Q_a = \frac{g_a}{g_e} Q_e \frac{\lambda_1^2}{\lambda_n^2}, \quad (14)$$

где Q_a и Q_e — соответственно эффективные сечения для поглощения и испускания γ -лучей, λ_1 — длина волны γ -лучей, λ_n — длина волны относительного движения ядра и нейтрона, а g_a и g_e — статистические веса, связанные с соответствующими процессами и зависящие от возможных конфигураций взаимодействующих систем. Вычислим сечение Q_e для соединения нейтрона с протоном, сопровождающегося излучением.

Эффективное сечение для соединения двух частиц с массами M_1 и M_2 и зарядами e_1 и e_2 , движущихся с относительной скоростью v , определяется формулой (6) § 2.2 главы XIII:

$$Q_e = \frac{64\pi^4}{3} \left(\frac{v}{c}\right)^3 \frac{1}{hv} (|X_{ок}|^2 + |Y_{ок}|^2 + |Z_{ок}|^2), \quad (15)$$

где $X_{ок}$, $Y_{ок}$, $Z_{ок}$ — матричные элементы трех составляющих электрического смещения по отношению к волновым функциям начального и конечного состояний. Исключая из рассмотрения движение центра тяжести, получаем для компонент электрического смещения:

$$(M_1 + M_2)^{-1} (e_1 M_2 - e_2 M_1) (x, y, z),$$

¹⁾ Fermi. Z. Physik, 88, 161, 1934.

²⁾ Milne, Phil. Mag., 47, 209, 1925.

Таблица I

Эффективные сечения для соединения нейтронов и протонов, сопровождающегося излучением (Q_e) и для взаимодействия γ -лучей с диплонами (Q_a) в единицах 10^{-28} см².

I. Для взаимодействия типа (7) при $a = 4 \times 10^{-13}$ см.

Энергия падающего нейтрона в эл.-вольтах	Предполагаемое значение энергии связи					
	$1,5 \times 10^6$ эл.-вольт		$2,0 \times 10^6$ эл.-вольт		$2,5 \times 10^6$ эл.-вольт	
$0,5 \times 10^6$	Q_e	Q_a	Q_e	Q_a	Q_e	Q_a
$1,0 \times 10^6$	0,39	20,3	0,46	10,4	0,33	6,9
$2,0 \times 10^6$	0,44	37,5	0,55	23,0	0,53	19,0
$3,0 \times 10^6$	0,53	50,0	0,63	44,5	0,62	32,0
$4,0 \times 10^6$	0,51	54,0	0,67	51,2	0,66	40,0
	0,49	51,0	0,66	52,0	0,69	44,0

При $a = 1,0 \times 10^{-13}$ см и $a = 0$ эффективные сечения составляют соответственно 0,42 и 0,33 приведенных здесь значений.

II. Для экспоненциальной формы взаимодействия ($V = -Ce^{-r/a}$).

Энергия падающего нейтрона в эл.-вольтах	Предполагаемое значение энергии связи 2×10^6 эл.-вольт			
	$a = 1,1 \times 10^{-13}$ см		$a = 3,4 \times 10^{-13}$ см	
	Q_e	Q_a	Q_e	Q_a
$0,5 \times 10^6$	0,37	11,6	0,90	28,0
$1,0 \times 10^6$	0,49	25,0	1,12	57,0
$2,0 \times 10^6$	0,53	37,0	1,16	81,0
$3,0 \times 10^6$	0,56	41,0	1,20	86,0
$4,5 \times 10^6$	0,55	43,3	1,17	93,0

где (x, y, z) — относительные координаты рассматриваемых частиц. Для случая нейтронов и протонов мы должны положить $e_1 = 0$, $e_2 = e$, что дает:

$$X_{ок} = \frac{1}{2} e \int x \Psi_0^*(r) \Psi_x(r) d\tau, \quad (16)$$

где Ψ_0 нормировано к единице, а Ψ_x имеет асимптотическую форму:

$$e^{ikz} + r^{-1} e^{ikz} f(\theta, p) \quad \left(k = \frac{2\pi M_1 M_2 v}{M_1 + M_2 h} \right).$$

Для энергии взаимодействия вида (7) вычисление Q_a легко может быть выполнено. Q_a может быть получено с помощью соотношения (14). В рассматриваемом случае $g_a = 6$ (2 для направлений поляризации γ -лучей, 3 — для спина диллона), $g_a = 4$ (по 2 для спинов протона и нейтрона). Результаты подобного рода вычислений приведены в таблице I.

Из приведенных данных следует, что зависимость Q_a от скорости нейтронов значительно более сходна с рассмотренной в § 3.5 главы XIII закономерностью, наблюдающейся при образовании отрицательных ионов в результате захвата электронов нейтральными атомами, нежели со случаем захвата положительными ионами (см. главу XIII, § 2.26). Это обстоятельство связано с аналогией между нейтроном и нейтральным атомом в смысле ограниченности радиуса действия их силовых полей.

Эффективное сечение для излучения столь мало, что по всей вероятности оно лежит за пределами чувствительности современной экспериментальной техники, но Q_a достаточно велико для того, чтобы быть наблюдаемым; Чадвик и Гольдгабер измерили его величину для γ -лучей с энергией $2,6 \times 10^6$ эл.-вольт. Они получили при этом значение 10^{-28} см², что значительно меньше вычисленного, если только энергия связи диллона не очень велика по сравнению с принятым выше значением. Дальнейшие опыты в этом направлении являются весьма существенными, так как путем сравнения опытных и теоретических данных можно, по крайней мере принципиально, определить энергию связи диллона, тем более что теоретические величины весьма мало чувствительны к изменениям формы энергии взаимодействия как функции расстояния. Это обстоятельство может быть иллюстрировано с помощью таблицы I путем сравнения величин, вычисленных для поля (7), с величинами, получаемыми в предположении экспоненциального закона взаимодействия.

Совершенно ясно, что поскольку теоретические и экспериментальные данные согласуются приблизительно в случае Q_a , расхождение между ними для Q_e могло бы иметь место лишь в весьма неправдоподобном случае неприменимости термодинамического соотношения (14). В действительности однако многие исследования указывают на очень большие значения Q_e . Так, например, Ли нашел, что при столкновении нейтронов с протонами испускаются γ -лучи большой интенсивности и с длиной волны того самого порядка величины, который соответствует энергии соединения протона с нейтроном. Опыты Ферми и его сотрудников¹⁾, посвященные искусственной радиоактивности, вызываемой нейтронами, свидетельствуют о большой вероятности поглощения нейтронов при столкновении их с легкими ядрами, которое должно сопровождаться излучением избыточной энергии. Поскольку мы не собираемся модифицировать термодинамическую теорию, необходимо найти объяснение этих результатов, представляющих значительный интерес. Одно из возможных объяснений опытов Ли заключается в том, что рассмат-

риваемое излучение может быть отнесено к типу, исследованному нами в начале этой главы под литерой (с). Это предположение опровергается, однако, вычислением интенсивности непрерывного излучения с помощью формулы (33) главы XV. Интенсивность оказывается при этом чересчур малой даже по сравнению с вычисленным выше теоретическим значением интенсивности излучения*).

§ 3. Столкновения между заряженными ядрами

Перейдем теперь к рассмотрению столкновений двух заряженных ядер. В виду наличия заряда энергия взаимодействия при больших расстояниях между ядрами стремится к форме:

$$+ \frac{ZZ'e^2}{r},$$

где Z и Z' — атомные номера обоих ядер. Для объяснения стабильности сложных ядер, образованных соединением рассматриваемых более простых ядер друг с другом, мы должны постулировать наличие интенсивного притяжения между ними на малых расстояниях; в таком случае их взаимодействие может быть представлено схематически кривой, изображенной на рис. 66. Различие между этим полем и силовым полем, соответствующим взаимодействию нейтрона с ядром, заключается в наличии отталкивательного „хвоста“; этим обуславливаются существенные различия между эффектами, наблюдаемыми в обоих случаях.

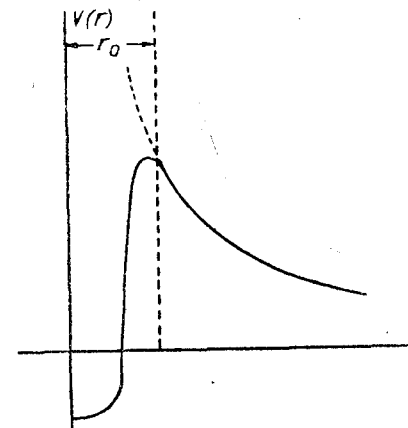


Рис. 66.]

§ 3.1. Упругие столкновения. Аномальное рассеяние. Вопрос о рассеянии чисто кулоновым полем сил был уже изучен нами в

*) В последнее время (1935 г.) намечались два выхода из указанных затруднений. Во-первых, Ферми показал, что излучение, связанное с соединением протона и нейтрона, зависит не только от заряда первого, но также и от магнитного момента последнего. Во-вторых, Бронштейн и Мамасаклисов показали, что, пользуясь предположением Майорана о характере сил взаимодействия между нейтроном и протоном (соответствующих притяжению при четных и отталкиванию при нечетных значениях углового квантового числа l) и предполагая, что при $l=0$ притяжение между ними в некотором промежуточном интервале расстояний сменяется отталкиванием (переходящим в притяжение при $l=1$) можно получить значительно большую вероятность соединения нейтрона с протоном по схеме $l=0 \rightarrow l=1$, нежели та, которая была вычислена в тексте, не вводя в действие магнитный момент протона.

главе III. Рассмотрим теперь наблюдающиеся отклонения от полученного простого закона рассеяния, обусловленные отклонением силового поля от кулоновой формы при малых расстояниях между ядрами. Эти отклонения приводят к так называемому аномальному рассеянию α -частиц, наблюдающемуся при столкновениях быстрых частиц с легкими ядрами.

Между теорией этого аномального рассеяния и теорией рассеяния плоских волн в некотором потенциальном поле существует тесная аналогия. Во втором случае нас интересует обусловленное наличием поля отклонение волн от плоской формы; в первом случае нас интересует отклонение их от формы, характерной для движения в кулоновом поле сил. В обоих случаях мы разлагаем волновую систему на группы элементарных волн разного порядка, соответствующие различным квантованным значениям углового момента. Воздействие возмущения приводит к сдвигам фаз, зависящим от порядка элементарной волны и от самого возмущения. Аномальное рассеяние может быть таким образом описано с помощью изменений фаз, соответствующих кулонову полю, обусловленных наличием „аномального“ поля, подобно тому как это делается в аналогичной задаче о рассеянии плоских волн, рассмотренной нами в главе II. Волновое уравнение для движения в поле, изображенном графически на рис. 66, может быть записано в виде:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} \left(E - \frac{ZZ'e^2}{r} + V(r) \right) \Psi = 0, \quad (17)$$

где $V(r)$ — отклонение от кулонова поля сил, являющееся функцией, быстро спадающей до нуля для значений $r > r_0$ (r_0 — радиус ядра), M^* — приведенная масса сталкивающихся ядер, Ze и Ze' — их заряды. Подобно тому, как это делалось в главе II, мы будем искать решение уравнения (17) в виде:

$$\Psi = r^{-1} \sum_n L_n(r) P_n(\cos \theta),$$

где

$$\frac{d^2 L_n}{dr^2} + \left\{ \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} \left(E - \frac{ZZ'e^2}{r} + V(r) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) \right\} L_n = 0. \quad (18)$$

При больших значениях r $V(r)$ очень мало и уравнение принимает форму, характерную для движения в чисто кулоновом поле сил:

$$\frac{d^2 L_n}{dr^2} + \left\{ \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} \left(E - \frac{ZZ'e^2}{r} \right) - \frac{n(n+1)}{r^2} \right\} L_n = 0. \quad (19)$$

Это уравнение было рассмотрено нами в § 4 главы III; при этом было показано, что существуют два его решения: L_n^s и L_n^c , имеющие асимптотический вид:

$$L_n^s \sim k^{-1} \sin \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n - \alpha \lg 2kr \right),$$

$$L_n^c \sim k^{-1} \cos \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n - \alpha \lg 2kr \right), \quad (20)$$

где

$$k^2 = \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} E, \quad \alpha = \frac{ZZ'e^2}{hv}, \quad \eta_n = \arg \Gamma(1 + n + i\alpha),$$

а v — относительная скорость сталкивающихся ядер. Асимптотическая форма решения уравнения (18) может быть таким образом записана в виде:

$$L_n \sim AL_n^s + BL_n^c \quad (21)$$

или

$$L_n \sim C \sin \left(kr - \frac{1}{2} n\pi + \eta_n + \varepsilon_n - \alpha \lg 2kr \right), \quad (22)$$

где ε_n — фазовая постоянная, равная $\arctg \left(\frac{B}{A} \right)$. Попробуем теперь определить аномальное рассеяние, обусловленное наличием $V(r)$ в уравнении (18).

В § 1 главы III было показано, что функция

$$L(r, \theta) = r^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n e^{i\eta_n} L_n^s(r) P_n(\cos \theta) \quad (23)$$

имеет асимптотический вид:

$$L(r, \theta) \sim I + Sf(\theta), \quad (24)$$

где $I = \exp [ikr \cos \theta + i\alpha \lg 2kr \sin^2 \frac{1}{2} \theta]$ представляет падающую волну, а $S = r^{-1} \exp [ikr - i\alpha \lg 2kr]$ — радиальную составляющую рассеянной сферической волны; $f(\theta)$ определяется выражением:

$$f(\theta) = \frac{\alpha}{2k} \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} \exp [-i\alpha \lg (1 - \cos \theta) + i\pi + 2i\eta_0]. \quad (25)$$

Составим теперь функцию:

$$\Psi(r, \theta) = r^{-1} \sum (2n+1) i^n e^{i(\eta_n + \varepsilon_n)} L_n(r) P_n(\cos \theta), \quad (26)$$

где L_n имеет асимптотический вид (22). Из уравнения (23) следует, что эти ряды имеют асимптотическую форму

$$\left. \begin{aligned} I + Sf(\theta) + \frac{r^{-1}}{2ik} \exp [ikr - i\alpha \lg 2kr] \times \\ \times \sum_n (2n+1) e^{2i\tau_n} (e^{2i\sigma_n} - 1) P_n(\cos \theta), \end{aligned} \right\} (27)$$

соответствующую падающей волне I и рассеянной сферической волне. Этот ряд пригоден, таким образом, для описания волновой функции, соответствующей случаю рассеяния полем

$$\frac{ZZ'e^2}{r} - V(r).$$

Интенсивность рассеяния определяется выражением:

$$\left| f(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_n (2n+1) e^{2i\tau_n} (e^{2i\sigma_n} - 1) P_n(\cos \theta) \right|^2, \quad (28)$$

первый член которого соответствует кулонову полю сил, а второй — аномальному рассеянию. Воспользовавшись значением $f(\theta)$, определяемым выражением (25), для интенсивности рассеяния получаем:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{4k^2} \left| \alpha \exp \left[-i\alpha \lg \sin^2 \frac{\theta}{2} + i\pi + 2i\tau_0 \right] \operatorname{cosec}^2 \frac{\theta}{2} - \right. \\ \left. - i \sum_n (2n+1) e^{2i\tau_n} (e^{2i\sigma_n} - 1) P_n(\cos \theta) \right|, \end{aligned} \right\} (29)$$

а отношение рассеяния к значению $|f(\theta)|^2$, соответствующему чисто кулонову полю, равно:

$$\begin{aligned} R = \left| 1 + i\alpha^{-1} \sin^2 \frac{\theta}{2} \exp \left[i\alpha \lg \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \right. \\ \left. + 1) e^{2i(\tau_n - \tau_0)} (e^{2i\sigma_n} - 1) P_n(\cos \theta) \right|^2. \end{aligned} \quad (30)$$

Это отношение определяется только сдвигом фаз σ_n (и, конечно, постоянными, связанными с кулоновым полем) точно таким же образом, как рассеяние частицы потенциальным полем зависит от сдвигов фаз τ_m , обусловленных наличием поля.

Для исследования сходимости рядов (30) найдем приближенное выражение для σ_n в случае малости аномального эффекта. С этой целью запишем уравнение (17) в виде:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} \left(E - \frac{ZZ'e^2}{r} \right) \Psi = - \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} V(r) \Psi. \quad (31)$$

Если влияние $V(r)$ мало, мы можем получить приближенное решение этого уравнения, подставляя в правую его часть вместо функции Ψ решение $L(r, \theta)$ уравнения:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} \left(E - \frac{ZZ'e^2}{r} \right) \Psi = 0, \quad (32)$$

характеризующего рассеяние в кулоновом поле. С помощью изложенного в главе IV метода находим асимптотическую форму искомого решения:

$$\Psi \sim I + S \left[f(\theta) + \frac{2\pi M^*}{h^2} \int V(r') L(r', \theta') L(r', \pi - \Theta) dr' \right], \quad (33)$$

где

$$\cos \Theta = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi').$$

Третий член этого выражения характеризует аномальное рассеяние. Вспоминая, что $L(r', \theta')$ имеет форму (23) и воспользовавшись уравнением (26), для малых σ_n получаем:

$$\sigma_n = \frac{8\pi^2 M^*}{h^2} \int_0^{\infty} V(r') L_n^*(r') L_n^*(r') dr' \quad (34)$$

— выражение, совершенно аналогичное полученному нами при рассмотрении рассеяния частицы в потенциальном поле (§ 2 главы II). Эта формула справедлива только в том случае, когда правая ее часть мала; поэтому достаточно выяснить, при каких условиях фаза σ_n является малой. Исследование подынтегральной функции выражения (34) показывает, что это имеет место в случае малого наложения функций L_n^* и потенциала $V(r)$ (*). Эти функции малы внутри классического расстояния наибольшего сближения в поле $\frac{ZZ'e^2}{r}$ для частиц с угловым

моментом $\frac{h}{2\pi} [n(n+1)]^{1/2}$; условие малости σ_n сводится таким образом к малости потенциала $V(r)$ за пределами этого расстояния. Если r_0 — эффективный радиус действия для $V(r)$ (r_0 — радиус ядра), это условие может быть записано в виде:

$$kr_0 \ll n. \quad (35)$$

Для столкновений α -частиц с наиболее легкими ядрами ${}^1_1\text{H}$ и ${}^2_1\text{D}$ это условие удовлетворяется при всех значениях $n > 0$, так что величина R в этом случае может быть записана в форме:

$$R = \left| 1 + i\alpha^{-1} \left(e^{2i\tau_0} - 1 \right) \exp \left\{ i\alpha \lg \sin^2 \frac{\theta}{2} \right\} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right|^2, \quad (36)$$

* Т. е. малости значений функций L_n^* в тех точках r' , где потенциал $V(r)$ заметно отличается от нуля. (Прим. ред.)

содержащей только один фазовый параметр ε_0 . Легко сравнить это выражение с опытными данными, не определяя самого значения ε_0 . Необходимо лишь проверить возможность путем соответствующего выбора ε_0 добиться совпадения отношения I для любых углов рассеяния при заданном значении k с экспериментальными данными. К сожалению, единственные имеющиеся экспериментальные данные — для водорода — не очень точны; Тэйлор¹⁾ показал, однако, что формула (36) дает достаточно хорошее согласие с опытом для углового распределения протонов, отброшенных при столкновениях с α -частицами. Это обстоятельство иллюстрируется рис. 67. Интересной чертой излагаемой

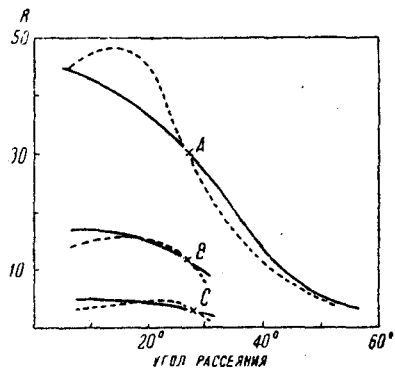


Рис. 67.

Он предположил при этом:

$$V(r) = 0 \text{ при } r > r_0 \\ = -\frac{ZZ'e^2}{r} - C \text{ при } r < r_0 \quad (37)$$

и нашел, что экспериментальные данные могут быть получены при $r_0 = 4,3 \times 10^{-13}$ см и $C = 6 \times 10^6$ эл.-вольт. Экспериментальные данные не дают достаточного материала для точного определения формы функции $V(r)$; можно однако надеяться, что дальнейшее изучение вопроса поможет найти эту функцию.

При рассмотрении столкновений α -частиц с более тяжелыми ядрами помимо ε_0 следует ввести в рассмотрение также и фазы более высокого порядка; дальнейшее теоретическое исследование становится невозможным, без каких-либо априорных сведений о величине этих фаз.

При изучении столкновений этого типа мы встречаемся, однако с новым явлением, к рассмотрению которого и перейдем.

§ 3. 11. Резонансные или виртуальные уровни. Рассмотрим движение частицы массы M в потенциальном поле:

$$V = D \quad r > r_0, \\ = -C \quad r < r_0. \quad (38)$$

Все частицы, кинетическая энергия которых $< D$, должны быть сосредоточены в области $r < r_0$, причем возможные энергии их квантованы. Для определения этих квантованных значений энергии мы должны решить соответствующее уравнение Шредингера. Собственные функции этого уравнения имеют вид:

$$R_{nl}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{\pm im\varphi},$$

причем R_{nl} удовлетворяет уравнениям:

$$\frac{d^2}{dr^2} (r R_{nl}) + \left(\nu^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) (r R_{nl}) = 0, \quad r < r_0, \\ \frac{d^2}{dr^2} (r R_{nl}) - \left(\nu^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) (r R_{nl}) = 0, \quad r > r_0, \quad (39)$$

где

$$\nu^2 = \frac{8\pi^2 M}{h^2} (E + C), \quad \nu^2 = \frac{8\pi^2 M}{h^2} (D - E).$$

При $E - D < 0$ соответствующие собственные функции:

$$R_{nl} = A r^{-1/2} J_{l+1/2}(\nu r), \quad r < r_0 \\ = B r^{-1/2} K_{l+1/2}(\nu r), \quad r > r_0, \quad (40)$$

где $K_{l+1/2}(x)$ означает бесселеву функцию от мнимого аргумента,

с асимптотической формой $e^{-x} x^{-1/2}$. Условия непрерывности на границе $r = r_0$ дают:

$$A J_{l+1/2}(\nu r_0) = B K_{l+1/2}(\nu r_0) \\ A \nu J'_{l+1/2}(\nu r_0) = B \nu K'_{l+1/2}(\nu r_0), \quad (41)$$

так что E должно удовлетворять уравнению:

$$\frac{J_{l+1/2}(\nu r_0)}{\nu J'_{l+1/2}(\nu r_0)} = \frac{K_{l+1/2}(\nu r_0)}{\nu K'_{l+1/2}(\nu r_0)}. \quad (42)$$

В частном случае $l=0$, т. е. для уровней S , с помощью явных выражений для функций Бесселя, получаем:

$$\lg(\nu r_0) = -\frac{\mu}{\nu}.$$

¹⁾ Taylor, Proc. Roy. Soc. A., 136, 605, 1932.

При некоторых условиях эти уравнения удовлетворяются положительными значениями E ($E < D$). Предположим теперь, что потенциал сил отталкивания D обращается в нуль при $r = r_1$, так что

$$\begin{aligned} V &= 0; & r > r_1, \\ &= D; & r_0 < r < r_1, \\ &= -C; & r < r_0. \end{aligned} \quad (43)$$

Отсюда следует, что при $r > r_1$ решение волнового уравнения, соответствующее $E > 0$, не будет стремиться к нулю экспоненциально, а будет представлять собой колебательную функцию типа:

$$\sin\left(kr + \frac{1}{2}\eta\right) \quad \left(k^2 = \frac{8\pi^2 ME}{h^2}\right).$$

Как легко видеть, при этом возможны все положительные значения E . Для собственных функций (при положительной энергии $E > D$) получаем:

$$\begin{aligned} Ar^{-1/2} J_{l+1/2}(kr), & \quad r < r_0, \\ Br^{-1/2} K_{l+1/2}(vr) + Cr^{-1/2} I_{l+1/2}(vr), & \quad r_0 < r < r_1, \\ Dr^{-1/2} J_{l+1/2}(kr) + Er^{-1/2} J_{-l-1/2}(kr), & \quad r > r_1, \end{aligned} \quad (44)$$

так как ограниченность области, соответствующей отрицательным значениям классической кинетической энергии, приводит к необходимости введения бесселевой функции $I_{l+1/2}(vr)$, которая в этой области асим-

птотически равна $\sim e^x x^{-1/2}$. Условия непрерывности при $r = r_0$ и $r = r_1$ дают четыре уравнения, вместе с условием нормировки оказывающиеся достаточными для определения отношений между пятью постоянными в выражениях (44) и не налагающие каких-либо ограничений на значения энергии. Выясним теперь что будет иметь место в том случае, когда условие (42) удовлетворяется. Условие непрерывности для функций (44) сводится при этом к

$$\begin{aligned} A = -D \frac{J'_{-l-1/2}(kr_1) - J'_{l+1/2}(kr_1)}{K'_{l+1/2}(vr_1)} \times \\ \times \frac{K'_{l+1/2}(vr_1)}{K'_{l+1/2}(vr_1)} \frac{J_{-l-1/2}(kr_1) - J_{-l-1/2}(kr_1)}{K_{l+1/2}(vr_1)} \times \\ \times \frac{K_{l+1/2}(vr_0)}{K_{l+1/2}(vr_1)}. \end{aligned} \quad (45)$$

Так как $K_{l+1/2}(x)$ при больших x имеет вид $e^{-x} x^{-1/2}$, это значит, что $\frac{A}{\sqrt{D^2 + E^2}} \approx e^{\nu(r_1 - r_0)}$, т. е. что волновая функция заметно отлична от нуля лишь в области $r < r_0$. Если уравнение (42) не удовлетворяется, то получаются противоположные соотношения и $\frac{A}{\sqrt{D^2 + E^2}} \approx e^{-\nu(r_1 - r_0)}$.

Таким образом, хотя оказываются возможными все положительные значения энергии и дискретных энергетических уровней в этом случае не существует, мы видим, что при выполнении условия (42) фактически осуществляются лишь уровни, весьма близкие к дискретным в том смысле, что максимальная амплитуда волновой функции (и следовательно максимальная плотность вероятности для частиц, представленных этой функцией) соответствует области радиуса $r = r_0$. Для энергий, не удовлетворяющих условию (42), величина амплитуды внутри области $r = r_0$ очень мала по сравнению с ее значением вне $r = r_1$. В связи с этим обстоятельством, энергии, для которых условие (42) удовлетворяется, определяются так называемые „виртуальные“ или „резонансные“ уровни; сталкиваясь с ядром, поле которого представлено схематически функцией (43), частица, движущаяся с подобной энергией, обладает очень большой вероятностью проникновения внутрь ядра.

Волновая функция (без нормирующего множителя) для частицы, движущейся в поле (43) с энергией $E < D$ может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} r^{-1} \sin(kr + \eta), & \quad r > r_1, \\ e^{\mp \nu(r_1 - r)} u(r), & \quad r < r_1, \end{aligned} \quad (46)$$

где $u(r)$ — функция с амплитудой порядка единицы. Знак минус в формуле (46) следует брать всегда, за исключением того случая, когда E соответствует резонансному уровню.

Резонансный уровень характеризуется не только определенным значением энергии, но и своей шириной, играющей весьма существенную роль в теории различного рода явлений, связанных с этими уровнями. Ширина уровня определяет быстроту убывания вероятности проникновения частицы при отклонении ее энергии от резонансного значения в ту или другую сторону и зависит от величины экспоненциального множителя, входящего в выражение (46). Определим ширину ΔE резонансного уровня таким образом, чтобы вероятность проникновения при энергии равной $E_0 \pm \frac{1}{2} \Delta E$ составляла половину вероятности проникновения, отвечающей резонансной энергии E_0 . Согласно приведенной выше схеме, вероятность проникновения пропорциональна $|A|^2$, где $Ar^{-1/2} J_{l+1/2}(vr)$ — решение, соответствующее

$r < r_0$ и примвающее в решению, имеющему асимптотическую форму $r^{-\frac{1}{2}} \sin(kr + \eta)$ при больших $r (> r_1)$. Условия непрерывности дают в этом случае при $l=0$;

$$|A_0|^2 = 4e^{-2\gamma(r_1-r_0)} \left[\left(1 + \frac{\nu^2}{k^2} \right) \left\{ e^{-4\gamma(r_1-r_0)} \left(\sin \mu r_0 - \frac{\mu}{\nu} \cos \mu r_0 \right) + \left(\sin \mu r_0 + \frac{\mu}{\nu} \cos \mu r_0 \right)^2 \right\} + \left(1 - \frac{\nu^2}{k^2} \right) e^{-2\gamma(r_1-r_0)} \left(\sin^2 \mu r_0 - \frac{\mu^2}{\nu^2} \cos^2 \mu r_0 \right) \right]^{-1}$$

$$\Delta E \approx e^{-2\gamma(r_1-r_0)} \frac{h^2 \nu}{2\pi^2 M r_0} \quad \text{при } \mu \gg \nu. \quad (47)$$

Отсюда следует, что чем больше плотность вероятности нахождения частицы внутри ядра на резонансном уровне, тем меньше ширина этого уровня.

Эти результаты получены нами на основании рассмотрения схематической модели; для истинных ядерных силовых полей мы можем ожидать, однако, совершенно аналогичных результатов. Для потенциала вида $V = -C$ при $r < r_0$ и $V = \frac{ZZ'\epsilon^2}{r}$ при $r > r_0$, как показал Гамов, с помощью асимптотической формы функций L_n^* и L_n^c для высоких порядков и больших расстояний, имеем:

$$|A_0|^2 = \frac{\mu^2 \nu}{k \cos^2 \mu r_0} \frac{e^{-2\alpha(2u - \sin 2u)}}{(\mu + \nu \operatorname{tg} \mu r_0)^2 + \frac{1}{4} e^{-4\alpha(2u - \sin 2u)} (\mu - \nu \operatorname{tg} \mu r_0)^2}$$

$$\Delta E = \frac{h^2}{2\pi^2 M r_0} \frac{\mu^2 \nu}{\mu^2 + \nu^2} \cdot e^{-2\gamma(2u - \sin 2u)},$$

где

$$\nu^2 = \frac{8\pi^2 M ZZ'\epsilon^2}{h^2 r_0} - k^2, \quad \mu^2 = \frac{8\pi^2 M C}{h^2} + k^2, \quad (48)$$

$$u = \operatorname{arctg} \frac{\nu}{k}, \quad \alpha = \frac{2\pi ZZ'\epsilon^2}{h\nu},$$

c — относительная скорость ядер, M — их приведенная масса. При $\nu^2 \gg k^2$ экспоненциальный множитель сводится к

$$\exp \left\{ -\frac{4\pi ZZ'\epsilon^2}{h\nu} + \frac{16\pi M}{h} \pi \sqrt{ZZ' r_0} \right\}. \quad (49)$$

В этом приближении положение резонансных уровней S определяется формулой (42) при $D = \frac{ZZ'\epsilon^2}{r_0}$. Экспоненциальный множитель, входящий в выражение (46), имеет в этом случае вид $\exp\{-2\alpha(2u - \sin 2u)\}$. С помощью этих формул мы приходим к заключению, что число существующих резонансных уровней всегда конечно и может также равняться нулю. Число их тем меньше, чем легче взаимодействующие ядра; для случая взаимодействия между водородным и гелиевым ядрами оно несомненно равно нулю. Для тяжелых ядер должно иметься большое число резонансных уровней, ширина их однако столь мала, что с помощью современной экспериментальной техники они не могут быть обнаружены (за исключением случая радиоактивных явлений).

Существование резонансных уровней должно, очевидно, играть существенную роль при выяснении природы аномального рассеяния. Если частица свободно проникает внутрь ядра, она должна оказаться под непосредственным воздействием мощного силового поля, и сдвиг фазы ϵ_l для такой частицы должен быть очень велик. Таким образом, при столкновении частиц с малыми энергиями аномальное рассеяние может быть обусловлено только наличием резонансных уровней, так как вероятность проникновения внутрь ядра частицы с другими значениями энергии исчезающе мала. Можно показать¹⁾, что при прохождении энергии частицы через значение энергии для резонансного уровня с азимутальным квантовым числом l фаза ϵ_l должна измениться на π .

Обозначим через f_1 и f_2 решения волнового уравнения для области $V > E$; пусть f_1 — решение, возрастающее экспоненциально с возрастом r (аналогично функции $r^{-\frac{1}{2}} I_{l+\frac{1}{2}}(\nu r)$ в (44)), а f_2 — решение,

убывающее с возрастанием r (аналогично функции $r^{-\frac{1}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\nu r)$ в (44)). Если $E = E_0$ — резонансная энергия, то решение в этой области равняется Af_1 . Для соседних значений r оно будет иметь вид:

$$A(f_1 + af_2).$$

При переходе E через резонансное значение E_0 a меняет знак, при $E > E_0$ мы можем положить $a > 0$. Фаза ϵ_l определяется условием непрерывности решения при переходе из области $V > E$ в область $E < V$. При $E > V$ решение носит колебательный характер. На границе раздела областей мы должны иметь $af_2 \gg f_1$, если только E не близко к E_0 . Так как a меняет знак между $E < E_0$ и $E > E_0$, то при $E > V$ решение должно переходить в равные и противоположные функции при значениях E , чуть меньших или чуть больших резонансного значения. Другими словами, разность фаз должна при этом равняться π .

¹⁾ Mott, Proc. Roy. Soc. A., 133, 228, 1931.

Возвращаясь к формуле (36), мы видим, что для резонансного уровня аномальное рассеяние принимает характер, иллюстрированный на рис. 68. Область значений энергии, для которой этот эффект имеет заметную величину, сравнима с шириной уровня и должна быть, таким образом, очень малой за исключением случая легких элементов. Для ядер типа алюминия существуют однако резонансные уровни (см. следующий параграф), для которых экспоненциальный множитель не слишком велик: интересно выяснить поэтому, — какой тип углового распределения будет соответствовать аномальному рассеянию вблизи резонансного уровня. Для S -уровня мы можем воспользоваться выражением (36) и положить

$\sigma_0 = \frac{\pi}{2}$ (значение, которое σ_0 принимает при энергиях, очень близких к резонансной). Зависимость коэффициента рассеяния R от θ изображена на рис. 69. Для более тяжелых элементов колебания R как функции θ становятся более быстрыми, однако трудность эксперимен-

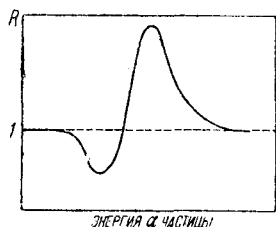


Рис. 68.

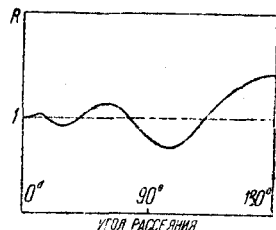


Рис. 69.

тального обнаружения эффекта увеличивается благодаря возрастающей узости области резонанса. Для уровней P и более высоких резонансных уровней этот эффект имеет аналогичный характер, при этом интенсивность рассеяния возрастает благодаря наличию множителя $(2n+1)$ в выражении (36).

До сих пор мы ограничивались рассмотрением аномального рассеяния, имеющего место, когда падающая частица не обладает энергией, достаточной (с точки зрения классической механики) для прохождения через потенциальный барьер ядра. Однако при столкновениях с наиболее легкими ядрами максимальная энергия α -частиц оказывается достаточной для прохождения их через барьер во внутриядерное поле. Для частиц с такими энергиями резонансных уровней не существует; при этом по мере возрастания энергии начинает играть роль сперва величина σ_0 , затем σ_1 , σ_2 и т. д. Воспользовавшись выражением (36), мы видим, что при больших углах рассеяния [для которых $P_n(\cos\theta) \approx (-1)^n$] максимальное значение R , соответствующее только σ_0 , составляет $1 + \frac{4}{\alpha^2}$, значение R , соответствующее σ_1 , равно $1 + \frac{36}{\alpha^2}$ и т. д. Мы можем поэтому ожидать, что изменение интенсивности рассеяния с изменением энергии при определенном значении угла рассеяния будет характеризоваться кривой, приведенной на рис. 70. Последняя находится в хоро-

шем согласии с опытами Рисслера¹⁾, получившего кривые точно такой же формы для рассеяния α -частиц бором и углеродом. Угловое распределение интенсивности для случая аномального рассеяния при больших значениях энергии должно иметь точно такой же характер, как и в случае аномального рассеяния частиц с энергией, соответствующей виртуальному уровню (рис. 69). Определяя положение максимумов аномального рассеяния, соответствующих σ_0 , σ_1 и т. д., мы можем получить сведения относительно размеров ядер, пользуясь при этом методами, аналогичными применявшимся нами при исследовании сходимости ряда, определяющего σ .

Резюмируя, мы видим, что до тех пор, пока энергия падающей частицы сравнима с высотой потенциального барьера ядра, аномальное рассеяние имеет место только для ограниченных областей энергии, близких к резонансным значениям. Форма этого рассеяния иллюстрируется рис. 68 и 69. Когда энергия становится сравнимой с высотой потенциального барьера или превышает ее, рассеяние становится аномальным, и интенсивность рассеяния при заданном большом угле с увеличением энергии частицы проходит через ряд возрастающих максимумов, соответствующих фазовым сдвигам σ_0 , σ_1 ... и т. д. (последние поочередно приобретают при этом наиболее существенное значение).

Изложенная здесь теория нуждается в более подробном экспериментальном подтверждении; последние замечания находятся, однако, в очевидном согласии с уже имеющимися опытными данными.

§ 3. 2. Неупругие столкновения между заряженными ядрами. Большинство имеющихся в настоящее время экспериментальных работ посвящено исследованию расщепления ядер при столкновении их с другими ядрами. Для определения вероятности такого процесса мы можем воспользоваться общими формулами, приведенными в главе VIII. Так, например, изложенные в § 4. 2 этой главы соображения применимы к тем случаям, когда налетающая частица захватывается ядром, тогда как в § 3. 1 изложена теория возбуждения или расщепления ядер, осуществляющегося без захвата сталкивающейся с ними частицы. Так как практически наиболее существенную роль играют процессы расщепления ядер, идущие с захватом частиц (см. § 1), мы остановимся прежде всего на их рассмотрении.

Возвращаясь к § 4. 2 главы VIII, обозначим сталкивающиеся ядра через A и B , а ядра, образовавшиеся в результате перераспределения частиц при столкновении, — через C и D . Выражение (68) главы VIII определяет дифференциальное сечение для такого столкновения, сопровождающегося перераспределением, с точностью первого прибли-

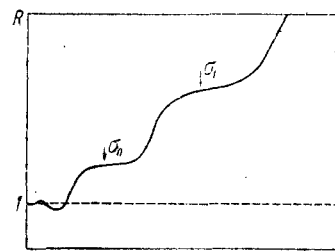


Рис. 70.

¹⁾ Riezler. Proc. Roy. Soc. A. 124. 154, 1931.

жения теории Борна. Для рассмотрения ядерных столкновений мы должны, однако, обобщить эту формулу, заменив плоские волны $e^{ik_n r}$ и $e^{ik'_n r'}$, характеризующие относительное движение систем A и B с одной стороны, C и D — с другой, волнами, искаженными в результате взаимодействия рассматриваемых ядер. При этом дифференциальное сечение принимает вид:

$$I(\theta, \varphi) d\omega = \frac{k'}{k} |g(\theta, \varphi)|^2 d\omega, \quad (50)$$

причем:

$$g(\theta, \varphi) = \frac{2\pi M'}{h^2} \int \int \int V(r'_C, r'_D, \varphi') F(r', \theta') G(\varphi', \pi - \Theta) \psi(r'_A, r'_B) \times \\ \times \varphi(r'_C, r'_D) d\tau'_C d\tau'_D d\varphi',$$

где r_A, r_B, r_C, r_D — внутренние координаты ядер A, B, C и D ; ψ и φ — волновые функции, характеризующие внутреннее движение в совокупности ядер A и B (ψ), C и D (φ), $V(r_C, r_D, \rho)$ — энергия взаимодействия ядер C и D ; $F(r, \theta)$ и $G(\rho, \vartheta)$ — собственные функции, удовлетворяющие уравнениям:

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2 F + \left(k^2 - \frac{8\pi^2 M}{h^2} V_{AB} \right) F &= 0, \\ \nabla^2 G + \left(k'^2 - \frac{8\pi^2 M'}{h^2} V_{CD} \right) G &= 0. \end{aligned} \right\} (51)$$

Асимптотическая форма этих функций:

$$\begin{aligned} F &\sim \exp ikr \cos \theta + e^{ikr} r^{-1} f(\theta, \varphi) \\ G &\sim \exp ik'\rho \cos \vartheta + e^{ik'\rho} \rho^{-1} g'(\vartheta, \varphi), \end{aligned}$$

где $\frac{hk}{2\pi}$ и $\frac{hk'}{2\pi}$ — импульсы, соответствующие относительному движению A и B, C и D ; M, M' — приведенные массы A и B, C и D , а

$$\cos \Theta = \cos \vartheta' \cos \theta + \sin \vartheta' \sin \theta \cos(\varphi' - \varphi).$$

V_{AB} — энергия взаимодействия ядер A и B при их столкновении,

V_{CD} — энергия взаимодействия ядер C и D при их образовании при столкновении.

Функции F и G были уже рассмотрены нами в предыдущих параграфах, так как они совершенно аналогичны функциям, характеризующим упругие столкновения ядер A и B, C и D . За исключением случая наиболее легких ядер, энергия бомбардирующих частиц оказывается недостаточной для прохождения их через потенциальный барьер ядра, так что согласно формулам (46) и (48), мы можем положить

$$F(r) = \sum F_s P_s(\cos \theta),$$

где

$$\begin{aligned} F_s &\sim r^{-1} \sin \left(kr + \frac{1}{2} s\pi + \tau_s \right), & r > r_1 & \quad (52) \\ &= \exp \{ \pm 2\alpha (2u - \sin 2u) \} u_s(r), & r < r_0. & \end{aligned}$$

При этом максимальная амплитуда функции $u_s(r)$ — порядка единицы, α и u — значения величин, определяемых выражением (48) для ядер A и B . Знак плюс в экспоненциальном множителе следует брать только в том случае, когда энергия падающей частицы соответствует резонансному уровню. Форма функции G зависит от внутренней энергии, освобождающейся при столкновении, так что

$$G(\rho, \vartheta) = \sum G_s(\rho) P_s(\cos \vartheta),$$

причем

$$G_s \sim r^{-1} \sin \left(k'\rho + \frac{1}{2} s\pi + \tau'_s \right) \quad \rho > r'_1$$

и либо

$$G_s = \exp \{ \pm 2\alpha' (2u' - \sin 2u') \} v_s(\rho) \quad \rho < r'_0, \quad (53)$$

либо же

$$G_s = w_s(\rho),$$

где $v_s(\rho)$ и $w_s(\rho)$ — функции, максимальные амплитуды которых порядка единицы. Первое решение при $\rho < r'_0$ следует брать только в том случае, когда кинетическая энергия C по отношению к D меньше высоты их взаимного потенциального барьера.

Эффективное сечение Q_{AB}^{CD} для такого типа столкновений, сопровождающихся перераспределением частиц, может быть записано в виде:

$$Q = \frac{4\pi}{kk'} \sum_{s,t} \frac{\bar{V}_{st}^2}{E_{AB} E_{CD}} g, \quad (54)$$

где \bar{V}_{st} — среднее значение энергии взаимодействия ядер $V(r_C, r_D, \rho)$, взятое по отношению к функциям u_s, v_t (или w_t), φ, ψ , а g определяется экспоненциальными множителями, входящими в F и G . E_{AB} и E_{CD} представляют собой относительные кинетические энергии ядер

A и B, C и D , а величина $\frac{V_{st}^2}{E_{AB} E_{CD}}$ — порядка единицы для значений s, t вплоть до предельных значений, при которых функция u_s, v_t (или w_t) не налагаются заметно на функции φ, ψ , за исключением тех случаев, когда особые правила отбора приводят к уменьшению V_{st} . Для больших значений s, t предыдущее отношение чрезвычайно мало. В общем случае суммирование следует производить не по всем значениям s и t , а только по ограниченному числу этих значений, равному приблизительно

$(kk')^{-1/2} R$, где R — средний радиус сферы сил взаимодействия A , B и C , D . Величина Q — порядка $g\pi R^2$. Значения g для различных случаев приведены в таблице II¹⁾.

Таблица II

Взаимная кинетическая энергия A и B	Взаимная кинетическая энергия C и D	g
1. < высоты потенциального барьера между A и B		
а) не соответствует резонансному уровню	(α) > потенциального барьера между C и D	$\exp\{-2\alpha(2u - \sin 2u)\}$
	(β) < потенциального барьера между C и D и не соответствует резонансному уровню	$\exp\{-2\alpha(2u - \sin 2u) - 2\alpha'(2u' - \sin 2u')\}$
	(γ) < потенциального барьера между C и D и соответствует резонансному уровню	$\exp\{-2\alpha(2u - \sin 2u) + 2\alpha'(2u' - \sin 2u')\}$ если индекс < 0; 1 если индекс > 0
б) соответствует резонансному уровню	(α)	1
	(β)	$\exp\{2\alpha(2u - \sin 2u) - 2\alpha'(2u' - \sin 2u')\}$ если индекс < 0; 1 если индекс > 0
	(γ)	1
2. > высоты взаимного потенциального барьера	(α)	1
	(β)	$\exp\{-2\alpha'(2u' - \sin 2u')\}$
	(γ)	1

В действительности, в частности в случае опытов, относящихся к расщеплению ядер протонами, методы исследования являются столь

¹⁾ Для значений $s \gg kR$ или $l \gg kR$ функции u_s , c_l внутри ядра не будут иметь заметно отличных от нуля значений, т. е. не будут накладываться заметно на функции φ , ψ .

чувствительными, что могут быть обнаружены реакции, для которых $g < 10^{-4}$. Следует также помнить, что когда порядок Q определяется величиной $g\pi R^2$, то на самом деле он может быть значительно меньше (в некоторых случаях даже в 10^3 раз) благодаря приближенным правилам отбора (например, для ядерного спина), приводящим к значительному уменьшению интегралов. Рассмотрим теперь различные возможности, перечисленные в таблице II. Наиболее существенным является случай (1 α); он объединяет практически все случаи расщепления ядер искусственным образом создаваемыми пучками ядер. Вероятность возбуждения должна при этом иметь экспоненциальный характер, что находится в хорошем согласии с опытными данными. Случай (1 $\alpha\beta$) представляется мало интересным в виду малой вероятности его осуществления. Процессы типа (1 $\alpha\gamma$), (1 $\beta\beta$), (1 $\beta\gamma$), (2 β), (2 γ) до сих пор наблюдаемы не были, мы ограничимся поэтому рассмотрением случая (1 $\beta\alpha$). Следует заметить, что мы исключили из рассмотрения экспоненциальные множители с положительным показателем, входящие в g в случае резонанса. Это обстоятельство связано с тем, что метод искаженных волн вблизи резонансного уровня оказывается неприменимым; мы можем поэтому только предположить, что если вероятность взаимного проникновения ядер A и B равна единице, то эффективное сечение будет величиной порядка πR^2 .

Эффективное сечение для случая резонанса (1 $\beta\alpha$) превышает таким образом в $\exp\{2\alpha(2u - \sin 2u)\}$ раз величину сечения для случая (1 $\alpha\alpha$); однако, в действительности бомбардирующие ядра никогда не бывают вполне однородными по скорости и претерпевают потерю энергии, которую они передают отбрасываемым ими (без расщепления) ядрам. Ширина резонансного уровня определяется экспоненциальной функцией вида $\exp\{-2\alpha(2u - \sin 2u)\}$, так что высокий выход реакции может иметь место только в том случае, когда падающие ядра обладают кинетическими энергиями, отличающимися от резонансного значения на величины соответствующего порядка. Чем уже резонансный уровень, тем меньше этот интервал значений энергии и тем меньше та доля общего числа сталкивающихся ядер, которая может обусловить высокую вероятность их расщепления. На основе принципа сохранения заряда можно показать, что максимальное сечение для расщепления ядер вблизи резонансного уровня равняется¹⁾

$$\frac{(2n+1)\lambda^2}{4\pi} \quad (55)$$

где λ — длина волны относительного движения ядер, а n — азимутальное квантовое число резонансного уровня. Легко убедиться в том, что обычно количество расщепляющихся ядер при начальной энергии, близкой к резонансному значению, не слишком превышает количество их при других условиях. Без потери общности результатов мы можем в дальнейшем предположить, что ядро A представляет собой α -частицу.

¹⁾ Mott, Proc. Roy. Soc. A., 133, 228, 1931.

Если $Q(E)$ — эффективное сечение для расщепления ядра α -частицей с энергией E , то вероятность расщепления на пути dx в области, содержащей N ядер на единицу объема, определяется выражением:

$$NQ(E) dx.$$

Полная вероятность P расщепления ядра α -частицей на всем ее пути

$$P = N \int_{v_0}^0 Q(E) \frac{dx}{dv} dv,$$

где v_0 — начальная скорость α -частицы. Для нахождения $\frac{dx}{dv}$ мы воспользуемся законом Томсона-Уиддингтона:

$$v^3 = k(x_0 - x),$$

откуда следует:

$$P = \frac{3N}{k} \int_0^{v_0} Q(E) v^2 dv.$$

Если рассматриваемый интервал не содержит резонансного значения энергии, мы имеем

$$Q(E) \approx \exp\left(-\frac{\alpha}{v} + \beta\right) \pi R^2, \quad [\text{см. (49)}]$$

откуда

$$P = P_1 = \frac{3N}{k} \pi R^2 e^{\beta} \int_0^{v_0} e^{-\frac{\alpha}{v}} v^2 dv \approx \frac{N}{k} \pi R^2 e^{\beta - \frac{\alpha}{v_0}} v_0^3. \quad (56)$$

Если резонансный уровень соответствует скорости v_1 , то

$$Q(E_1) \leq \frac{\lambda^2}{4\pi^2} (2n + 1),$$

а для области Δv вблизи резонанса:

$$P = P_2 \leq \frac{3N}{k} \frac{\lambda^2}{4\pi^2} (2n + 1) v_1^2 \Delta v.$$

Отсюда согласно (48)

$$P = P_2 \leq \frac{3N}{k} \frac{\lambda^2}{4\pi^2} (2n + 1) \frac{h}{2\pi M} \frac{v}{kr_0} v_1^2 e^{-\frac{\alpha}{v_1} + \beta}.$$

В этом случае полная вероятность равна $P_1 + P_2$ и не слишком сильно превышает P_1 ($P_2 \approx \frac{\lambda^4}{r_0^4} P_1$), так как P_1 и P_2 содержат одни и те же экспоненциальные множители. Резонансный эффект должен был бы быть значительно более заметным при малых скоростях сталкивающихся частиц, абсолютная величина этого эффекта убывает однако экспоненциально по мере уменьшения v . Резонансные уровни были наблюдаемы различными исследователями при расщеплении легких элементов α -частицами. Их присутствие проявляется в наличии максимумов функции, характеризующей вероятность расщепления в зависимости от энергии α -частиц.

При рассмотрении расщепления ядер вблизи резонансного уровня интересно также выяснить следующий вопрос. Взаимодействие сталкивающегося ядра с отбрасываемым ядром, связанное с величиной вероятности расщепления, „притупляет“ резонанс. Другими словами, ширина резонансного уровня при этом возрастает, и величина волновой функции для резонансных значений энергии соответственно уменьшается. Подробное исследование этого обстоятельства является затруднительным, так как оно связано с нахождением более точного решения задачи о расщеплении, нежели это дает метод искаженных волн; искомое решение весьма сходно с рассмотренным в § 10 главы X для вероятности электронного обмена при столкновении медленных электронов с атомами. Весьма вероятно, что это „притупление“ несколько уменьшает эффективное сечение по сравнению с его максимальным значением (51), но что оно все же значительно превосходит величину, получаемую при отсутствии какого бы то ни было резонанса.

§ 3. 21. Возбуждение ядер; расщепление ядер, не сопровождающееся захватом частиц. Вопрос о возбуждении ядер и расщеплении их, не связанном с захватом частиц, может быть рассмотрен с помощью метода искаженных волн. В этом случае можно непосредственно воспользоваться формулой (32) § 3. 1 главы VIII. На основании соображений, аналогичных приведенным в последнем параграфе, ясно, что возбуждение тяжелых ядер весьма мало вероятно, так как эффективное сечение в этих случаях определяется функцией $(1 + \beta)$ таблицы II и содержит экспоненциальный множитель с удвоенным отрицательным показателем. В случае легких ядер падающее ядро проходит, однако, через потенциальный барьер и эффективное сечение становится сравнимым с размерами ядра. Вероятность расщепления тяжелых ядер без захвата частиц по всей вероятности значительно превышает вероятность их возбуждения, так как эффективное взаимодействие между рассеянным ядром и центром тяжести расщепляемого ядра должно быть в этом случае малым и не обусловит поэтому наличия второго экспоненциального множителя.

Имеется очень мало экспериментальных данных об этих процессах, за исключением упомянутых в § 1. 2 этой главы. Наши знания о взаимодействии между ядрами достаточно, однако, для вычисления вероятности расщепления простейших ядер α -частицами. Эффективное сечение для случая расщепления диплона α -частицами было вычислено Мессе и Мором с помощью формулы (32) главы VIII. Они предположили, что энергия взаимодействия α -частицы и диплона равняется сумме энергий взаимодействия α -частицы с нейтроном и протоном, составляющими ядро диплона, усредненной по всем положениям обеих частиц внутри ядра. Энергии взаимодействия $V_{p\alpha}$, $V_{n\alpha}$, V_{np} между протоном и α -частицей, нейтроном и α -частицей и нейтроном и протоном были выбраны в следующем виде:

$$V_{p\alpha} = + \frac{2e^2}{r} \left\{ \begin{array}{l} r > r_0, \\ = -C \end{array} \right. \quad V_{n\alpha} = 0 \left\{ \begin{array}{l} r > r_0, \\ = -C \end{array} \right. \quad V_{np} = 0 \left\{ \begin{array}{l} r > a \\ = -D \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} r > a \\ r < a \end{array} \right.$$

Если α -частица обладает энергией, достаточной для расщепления (только одна треть энергии α -частицы может быть превращена в внутреннюю энергию диплона), то она может пройти над потенциальным барьером диплона, так что в выражении вероятности не появится экспоненциальных множителей. Результаты вычисления приведены в таблице III для различных предполагаемых значений энергий связи диплона и для различных значений постоянной C . Зная потенциал возбуждения данного процесса (т. е. минимальную энергию, необходимую для расщепления), мы можем определить энергию связи диплона, а также массу нейтрона. Из значительной величины эффективного сечения диплона по отношению к столкновениям рассматриваемого типа следует, что определение этого потенциала возбуждения могло бы быть осуществлено достаточно точно для точного определения массы нейтрона.

Таблица III

Эффективные сечения для расщепления диплонов α -частицами

(A) — взаимная потенциальная энергия α -частицы и диплона внутри потенциального барьера равна нулю.

(B) — взаимная потенциальная энергия равна $6 \cdot 10^6$ эл.-вольт (значение полученное Тэйлором для энергии взаимодействия α -частицы с протоном).

Эффективные сечения в единицах 10^{-26} см².

Предполагаемая энергия связи диплона:

α -частицы от	$1,7 \times 10^6$ эл.-вольт		2×10^6 эл.-вольт		$2,3 \times 10^6$ эл.-вольт	
	A	B	A	B	A	B
Po	0,0001	0,0006	0	0	0	0
RaC _{1'}	0,72	5,0	0,23	2,2	0,04	0,6
ThC'	1,46	10,4	0,66	5,9	0,19	2,6

ОГЛАВЛЕНИЕ

Стр.

Глава I. Волновое уравнение

§ 1.	Волновая функция	9
§ 2.	Волновая механика стационарных электронных пучков	10
§ 3.	Примеры волновых функций, описывающих стационарные электронные пучки бесконечных плоских волн	13
§ 4.	Пучок электронов в свободном от сил пространстве	14
§ 5.	Одномерные задачи	16
§ 6.	Решение волнового уравнения для электрона в медленно меняющемся поле	18
§ 7.	Формулы для тока; сохранение заряда	19
§ 8.	Задачи, в которых $ \psi ^2$ меняется во времени	21
§ 9.	Волновые пакеты	23
§ 9. 1.	Одномерное движение волнового пакета в однородной среде	24

Глава II. Теория рассеяния потока частиц центром сил

§ 1.	Вычисление интенсивности рассеянных лучей	28
§ 2.	Соотношение между фазами и угловым моментом рассеянной частицы	34
§ 3.	Примеры рассеяния центральным полем	38
§ 3. 1.	Рассеяние "потенциальной ямой"	38
§ 3. 2.	Рассеяние малой непроницаемой сферой	39
§ 3. 3.	Рассеяние полем, обратно пропорциональным кубу расстояния	40

Глава III. Рассеяние пучка частиц в кулоновом поле

§ 1.	Введение	42
§ 2.	Решение волнового уравнения для случая рассеяния кулоновым полем	44
§ 3.	Обобщенные гипергеометрические ряды	47
§ 4.	Решение одного специального уравнения	50

Глава IV. Спин электрона

§ 1.	Магнитный момент атома	52
§ 2.	Магнитный момент электрона	56
§ 3.	Релятивистское волновое уравнение	61
§ 3. 1.	Анализ уравнений при скоростях электронов, сравнимых со скоростью света	64
§ 3. 2.	Природа неполяризованного пучка	65
§ 3. 3.	Магнитный момент атома согласно уравнению Дирака	67
§ 4.	Рассеяние быстрых электронов и уравнение Дирака	69
§ 4. 1.	Поляризация	72
§ 4. 2.	Рассеяние кулоновым полем	74
§ 5.	Решения уравнения Дирака, соответствующие отрицательной энергии. Положительный электрон	79
§ 6.	Приближенные решения уравнений Дирака для быстрых электронов	81

	Стр.
Глава V. Столкновение между двумя подвижными частицами (нерелятивистская теория)	
§ 1. Введение	83
§ 2. Взаимодействие двух различных частиц. Нерелятивистская теория без учета спина	83
§ 3. Теория взаимодействия двух одинаковых частиц	86
§ 3. 1. Доказательство того, что волновые функции, описывающие поведение двух тождественных частиц в невырожденном стационарном состоянии, либо симметричны, либо антисимметричны по отношению к координатам частиц	90
§ 4. Столкновение двух тождественных частиц, не обладающих спином	91
§ 4. 1. Кулоново поле	97
§ 5. Столкновения двух тождественных частиц, обладающих спином	98
§ 6. Столкновение одинаковых ядер	101
Глава VI. Неоднородные дифференциальные уравнения	
§ 1. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Общее решение	102
§ 2. Решение, удовлетворяющее граничным условиям	104
§ 3. Дифференциальные уравнения в частных производных	107
§ 3. 1. Асимптотическая форма решения	109
§ 4. Решение одного из уравнений	110
Глава VII. Рассеяние силовым центром	
§ 1. Приближение Борна	112
§ 1. 1. Замечания о рассеянии, определяемом формулой Борна	115
§ 2. Соотношение между формулой Борна и точной формулой для $f(\theta)$	115
§ 3. Классический предел квантовых формул рассеяния	116
Глава VIII. Общая теория атомных столкновений	
§ 1. Столкновения электронов с атомами водорода. Приближение Борна	122
§ 2. Общий случай столкновения двух тел	125
§ 3. Приближенные методы рассмотрения медленных столкновений	127
§ 3. 1. Метод искаженных волн	127
§ 3. 2. Случай точного резонанса	129
§ 3. 3. Метод возмущенных волновых функций	132
§ 3. 4. Критика различных методов	134
§ 4. Столкновения, сопровождающиеся перераспределением	136
§ 4. 1. Обмен электронами	136
§ 4. 2. Общий случай столкновений, сопровождающихся перераспределением	138
§ 4. 3. Принцип Паули и формулы рассеяния	139
§ 5. Столкновение двух систем, одна из которых первоначально находилась в состоянии покоя	140
Глава IX. Столкновения быстрых электронов с атомами. Упругое рассеяние — приближение Борна	
§ 1. Введение. Экспериментальные методы и результаты	142
§ 1. 1. Опыты, при которых наблюдаются эффекты, обусловленные как упругими, так и неупругими столкновениями	142
§ 1. 2. Опыты, в которых различные типы столкновений — упругие и неупругие — исследуются в отдельности	144

	Стр.
§ 2. Упругое рассеяние. Первое приближение Борна	146
§ 3. Рассеяние атомами водорода и гелия	146
§ 3. 1. Сравнение с опытными данными	148
§ 4. Вычисление $I(\theta)$ и Q_0 для сложных атомов	149
§ 4. 1. Применение метода Томаса — Ферми. Быстрые столкновения	150
§ 5. Применимость первого приближения Борна	154
§ 5. 1. Более высокие приближения метода Борна	157
§ 5. 2. Сравнение с опытными данными	158
Глава X. Упругое рассеяние медленных электронов атомами	
§ 1. Эффекты Рамзауера и Тоундсена	161
§ 2. Теория рассеяния медленных электронов. Метод частичных сечений	162
§ 3. Сходимость рядов частичных сечений	165
§ 4. Нижний предел скорости	165
§ 5. Общее применение метода частичных сечений	166
§ 6. Количественное применение метода частичных сечений	170
§ 7. Электронный обмен при упругих столкновениях	173
§ 8. Эффект электронного обмена при упругих столкновениях электронов с атомами водорода и гелия	174
§ 9. Пределы применимости приближений	179
§ 10. Результаты вычислений и сравнение с опытными данными	180
§ 11. Поляризационный эффект	182
Глава XI. Неупругие столкновения электронов с атомами	
§ 1. Общие формулы	186
§ 1. 1. Введение импульсов в качестве переменных	187
§ 2. Вычисление дифференциальных сечений для водорода и гелия. Угловое распределение неупруго рассеянных электронов	189
§ 2. 1. Возбуждение дискретных уровней	189
§ 2. 2. Возбуждение уровней непрерывного спектра. Ионизация	193
§ 2. 2. 1. Распределение выбрасываемых электронов по скоростям	195
§ 2. 3. Угловое распределение неупруго рассеянных электронов	197
§ 2. 3. 1. Атомы водорода	197
§ 2. 3. 2. Обобщение на случай сложных атомов	200
§ 3. Полные сечения	201
§ 3. 1. Возбуждение дискретных оптических уровней	201
§ 3. 2. Возбуждение рентгеновых лучей	203
§ 3. 3. Первичная ионизация	204
§ 3. 3. 1. Вероятность ионизации при больших скоростях столкновений	206
§ 3. 3. 2. Сравнение с классической теорией и с опытными данными	207
§ 3. 4. Распределение различных типов столкновений для быстрых электронов	208
§ 4. Вычисление задерживающей способности вещества для быстрых электронов	208
§ 4. 1. Вспомогательные теоремы	208
§ 4. 1. 1. Обобщенные вероятности перехода и интенсивности осцилляторов	208
§ 4. 1. 2. Теорема сложения обобщенных интенсивностей осцилляторов	209
§ 4. 2. Вычисление задерживающей способности вещества	211
§ 4. 2. 1. Водород	211

	Стр.
§ 4. 22. Сложные атомы	214
§ 4. 23. Сравнение с экспериментальными данными	215
§ 4. 24. Относительная роль слабых и сильных столкновений в торможении быстрых электронов	217
§ 4. 25. Параметрический метод	218
§ 4. 26. Многократная ионизация и возбуждение	218
§ 5. Неупругие столкновения медленных электронов с атомами	220
§ 5. 1. Применение теории столкновений	220
§ 5. 2. Численные расчеты для гелия и сравнение с опытными данными	222
§ 5. 3. Возбуждение тяжелых атомов	224
§ 6. Заключительные замечания и физический смысл теории рассеяния медленных электронов	227
 Глава XII. Столкновения электронов с молекулами	
§ 1. Введение	230
§ 2. Рассеяние аксиально симметричным полем	231
§ 3. Упругое рассеяние в молекулярном водороде	232
§ 4. Рассеяние сложными молекулами	234
§ 5. Применение метода Факсена и Хольстмарка	236
§ 6. Неупругие столкновения с молекулами. Возбуждение электронных уровней. Принцип Франка-Кондона	238
§ 7. Диффракция неупруго рассеянных электронов молекулой	239
§ 8. Диссоциация молекул водорода при электронном ударе	242
§ 9. Возбуждение внутримолекулярного движения электронным ударом	245
§ 10. Рассеяние электронов от кристаллических поверхностей	246
§ 10. 1. Вторичная электронная эмиссия	248
 Глава XIII. Столкновения между тяжелыми частицами	
§ 1. Физическая сущность рассматриваемых явлений	249
§ 1. 1. Прохождение быстрых тяжелых частиц через материю	249
§ 1. 2. Передача заряда при столкновении	249
§ 1. 3. Передача возбуждения	249
§ 1. 4. Упругие столкновения атомов газа	250
§ 1. 5. Подвижности положительных ионов в газах	250
§ 1. 6. Возбуждение внутримолекулярных движений	250
§ 1. 7. Общий случай химических реакций	251
§ 2. Быстрые столкновения тяжелых частиц	252
§ 2. 1. Задерживающая способность материи для быстрых положительных ионов	252
§ 2. 2. Захват электронов быстрыми положительными ионами	252
§ 2. 3. Медленные столкновения тяжелых частиц	259
§ 3. 1. Упругие столкновения атомов газа	259
§ 3. 2. Передача возбуждения	263
§ 3. 21. Тушение резонансного излучения ртути	268
§ 3. 22. Поглощение положительных ионов. „Перезарядка“	268
§ 3. 23. Возбуждение натрия возбужденными атомами ртути	263
§ 3. 3. Теория резонансных явлений	264
§ 3. 31. Случай сильного взаимодействия	268
§ 3. 4. Прохождение положительных ионов через газы	272
§ 3. 5. Столкновения с участием отрицательных ионов	275

§ 3. 6. Обмен энергии между поступательным движением и молекулярным колебанием и вращением	277
§ 3. 7. Столкновение атомов с кристаллами	279
§ 3. 71. Коэффициенты аккомодации	279
§ 3. 72. Ионизация электронов металлами в результате столкновения с положительными ионами и метастабильными атомами	280
 Глава XIV. Определение вероятностей по методу варьирования параметров	
§ 1. Введение	281
§ 2. Возбуждение атома возмущением, зависящим от времени	282
§ 2. 1. Ионизация атома в результате воздействия возмущения, зависящего от времени	285
§ 8. Переходы, обусловленные периодическим во времени возмущением	288
§ 3. 1. Ионизация атома водорода световой волной	292
§ 4. Переходы, обусловленные независимым от времени возмущением	292
§ 4. 1. Начальное и конечное состояния некваंटованы; рассеяние пучка электронов силовым центром	298
§ 4. 2. Начальное состояние кваंटовано, конечное состояние некваंटовано	293
 Глава XV. Релятивистская теория столкновений. Столкновения, сопровождающиеся излучением. Образование пар электронов. Аннигиляция позитронов.	
§ 1. Релятивистская квантовая механика. Применение западающих потенциалов	294
§ 2. Релятивистская трактовка задач теории столкновений	297
§ 3. Столкновение двух свободных электронов	300
§ 4. Столкновения, сопровождающиеся излучением	301
§ 4. 1. Релятивистская теория	302
§ 4. 12. Излучение, испускаемое электронами	303
§ 4. 13. Интенсивность и поляризация непрерывного излучения	307
§ 4. 14. Угловое распределение рассеянных электронов	309
§ 4. 2. Релятивистская теория столкновений, сопровождающихся излучением	309
§ 5. Создание пар	315
§ 5. 1. Создание пар световыми квантами	315
§ 5. 2. Создание пар материальными частицами	319
§ 6. Аннигиляция положительных электронов	320
 Глава XVI. Ядерные столкновения	
§ 1. Экспериментальные методы и результаты	323
§ 1. 1. Опыты, при которых наблюдаются упругие столкновения ядер	323
§ 1. 2. Расщепление ядер и их возбуждение	324
§ 1. 3. Столкновения, связанные с излучением	325
§ 2. Столкновения с участием нейтронов	325
§ 2. 1. Упругие столкновения между нейтронами и ядрами	325
§ 2. 2. Столкновения нейтронов с протонами, диллонами и ядрами, гелия	326

	Стр.
§ 2. 3. Неупругие столкновения нейтронов с ядрами	331
§ 2. 4. Столкновения нейтронов с ядрами	331
§ 2. 5. Столкновения с участием нейтронов, сопровождающиеся излучением	332
§ 3. Столкновения между заряженными ядрами	335
§ 3. 1. Упругие столкновения. Аномальное рассеяние	335
§ 3. 11. Резонансные или виртуальные уровни	341
§ 3. 2. Неупругие столкновения между заряженными ядрами	347
§ 3. 21. Возбуждение ядер; расщепление ядер, не сопровождающееся захватом частиц	353

Ответственный редактор *М. А. Ельяшевич* Технический редактор *Е. А. Максимова*
 Сдано в набор 10/III 1935 г. Подписано к печати 13/V 1936 г. Формат бумаги 62×94.
 Тип. зн. в 1 бум. л. 102272. У.-а. л. 24. Бум. л. 5⁵/₈. Тираж 4000. Издат. № 376. Ленгорлит № 10720.
 Заказ № 347.