Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по квантовой теории в 7-м семестре
Парфёнову Константину Владимировичу

Парфёнов: В самый первый год, когда я преподавал, мне дали мою родную КТиФВЭ, квантстат, общефиз и геофизиков. У меня был тогда общий рейтинг на все группы, и студенты геофизики были стабильно внизу рейтинга. Проходит много лет, и ко мне на встречу с абитурой приходит выпускница геофизики, работающая в биофизической лабе в Германии, занимающаяся дизайном лекарств (не дизайном упаковок, конечно, а подбором компонентов и их доз под заказанные свойства препарата). И тут она при всех: «Знаете, там мне не смогли рассказать по квантам ничего сверх того, что давали Вы, спасибо Вам… но какая же вы сволочь!» И это при абитуре)))

Там у этой истории было продолжение

Парфёнов: Я спросил: а какой процент выполненных задач? В скольких процентах случаев удаётся подобрать соотношение, чтобы конечный препарат обладал нужными свойствами?
Она сказала, что в 100%. Я даже спросил: как так? Она ответила: если какой-то научной группе в срок не удаётся подобрать нужное соотношение, следующий заказ она не получит.
Я спросил: в чём секрет успеха?
Она: как-то раз американское правительство, недовольное возросшей долей Pfizer на рынке, заказало исследование эффективности их лекарств. Оказалось, что заявленным свойствам удовлетворяют лишь 35% препаратов, представленных на рынке. И это Pfizer, не самая плохая компания…

Если что, автор с уважением относится ко всем геофизикам. Более того, мои друзья знают, что я скорее хуже отношусь к теоретикам из-за их снобизма и не умению объяснять материал не-теоретикам (в первую очередь это касается термеха и квантстата, да и остальных предметов). Собственно, я пишу, чтобы теорфизика была доступна не только теоретикам ☺

Вывод борновского приближения

Важно понимать, что $\Psi(r,\theta,\varphi) = e^{i\bar{k}\bar{x}} + \frac{e^{i\bar{k}\bar{r}}}{r} f(\theta,\varphi)$ - это ГУ, т.е. верно лишь на бесконечности ($r \to \infty$). А что, если нам нужно найти $\Psi(r,\theta,\varphi)$ в любой точке? Ну, надо поставить задачу. Задача - это ДУ и ГУ. ДУ, конечно, будет стационарное ур-е Шрёдингера:

$$\frac{\Delta\Psi(r)}{2m} + U(r)\Psi(r) = E\Psi(r)$$

А ГУ $e^{i\bar{k}\bar{x}} + \frac{e^{i\bar{k}\bar{r}}}{r} f(\theta,\varphi)$.

Решением такой задачи будет ВФ, подчиняющаяся т.н. уравнению Липпмана-Швингера:

$$\psi(\overline{x}) = e^{i\overline{k}\overline{x}} + \int d\overline{y}\, G_0(\overline{x}, \overline{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\overline{y}) \psi(\overline{y})$$

$$\text{где} \quad G_0(\overline{x}, \overline{y}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\overline{x}-\overline{y}|}}{|\overline{x}-\overline{y}|}$$

Физический смысл – ВФ есть суперпозиция от наложения сферических волн, амплитуда которых пропорциональна величине потенциала V(y) и ВФ Ψ(y).

Ур-е Липпмана-Швингера – это интегральное уравнение, потому что неизвестная ВФ стоит как без интеграла, так и под интегралом:

$$\boxed{\psi(\overline{x})} = e^{i\overline{k}\overline{x}} + \int d\overline{y}\, G_0(\overline{x}, \overline{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\overline{y}) \boxed{\psi(\overline{y})}$$

Борновское приближение (борновский ряд) – один из способов решить данный интур. Подставим справа вместо Ψ(y) первое приближение – $\Psi_0(y)=e^{ikz}$:

$$\boxed{\psi_1(\overline{x})} = e^{i\overline{k}\overline{x}} + \int d\overline{y}\, G_0(\overline{x}, \overline{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\overline{y}) \boxed{\psi_0(\overline{y})}$$

То, что получилось, подставим ещё раз:

$$\boxed{\psi_1(\overline{x})} = e^{i\overline{k}\overline{x}} + \int d\overline{y}\, G_0(\overline{x}, \overline{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\overline{y}) \boxed{\psi_1(\overline{y})}$$

Подобными итерациями мы можем получать сколь угодно точное приближение. Если всё расписать через $\Psi_0(y)$, то получим действительно ряд:

$$\psi\left(\overline{x}\right)=\psi_0\left(\overline{x}\right)+\int d\overline{y}G_0(\overline{x},\overline{y})\frac{2m}{\hbar^2}\widehat{V}(\overline{y})\psi\left(\overline{y}\right)\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\psi\left(\overline{x}\right)=\underbrace{\psi_0\left(\overline{x}\right)}_{\text{0-е приб.}}+\underbrace{\int d\overline{y}G_0(\overline{x},\overline{y})\frac{2m}{\hbar^2}\widehat{V}(\overline{y})\psi_0\left(\overline{y}\right)}_{\text{1-е приб.}}+$$

$$+\underbrace{\int d\overline{y}G_0(\overline{x},\overline{y})\frac{2m}{\hbar^2}\widehat{V}(\overline{y})\int d\overline{z}G_0(\overline{y},\overline{z})\frac{2m}{\hbar^2}\widehat{V}(\overline{z})\psi_0\left(\overline{z}\right)}_{\text{2-е приб.}}+$$

$$+\underbrace{\int d\overline{y}G_0(\overline{x},\overline{y})\frac{2m}{\hbar^2}\widehat{V}(\overline{y})\int d\overline{z}G_0(\overline{y},\overline{z})\frac{2m}{\hbar^2}\widehat{V}(\overline{z})\int d\overline{w}G_0(\overline{z},\overline{w})\frac{2m}{\hbar^2}\widehat{V}(\overline{w})\psi_0\left(\overline{w}\right)}_{\text{3-е приб.}}+$$

Условия применимости

Борновское приближение можно применять, если выполнено одно из двух условий:

$$\varepsilon_{\text{B}}=\frac{2m}{h^2}\iiint\limits_{R^3}U(\boldsymbol{r})\frac{1}{r}dV(\boldsymbol{r})=\frac{2m}{h^2}\int\limits_0^\infty U(r)rdr\ll 1$$

ε_{B} - безразмерный борновский параметр. Никакого отношения к энергии (а то на статах любят за ε обозначать энергию) он не имеет.

Это достаточные условия. Т.е. если они выполнены, то точно можно! А если НЕ выполнено ни то, ни то, то, может, и можно, просто требуется дополнительное исследование.

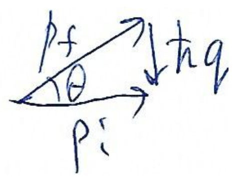
Как решать задачи?

Напомним, что нам бы найти амлитуду рассеяния. В упругих рассеяниях это

$$\frac{\text{б}\sigma}{d\Omega}(\theta)=|f(\theta)|^2$$

Первое борновское приближение утверждает, что

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi h^2}\iiint\limits_{R^3}U(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{qr}}dV(\boldsymbol{r})$$

Где **q** – $|q|=\frac{2p_i}{\hbar}\sin\theta/2$ и направлено вот так вот: 

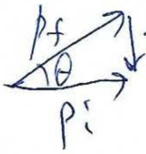
Давайте разберём пример, там всё станет понятно:

Решим задачу: $U(r) = -\frac{g^2}{r}e^{-\alpha r}$, где α – const.
Это потенциал имеет название – п-ал Юкавы.

1: Пишем формулу для амплитуды рассеяния:

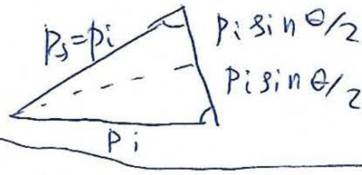
$$\frac{d\sigma}{d\Omega(\theta)} = |f(p_i, \theta)|^2$$

2: Найдём $\bar{q}$, который мы позже подставим в формулу для f:



$$|q| = \frac{2p_i}{\hbar}\sin\theta/2$$

(т.к. треугольник равнобедренный:



3: Пишем формулу для амплитуды f в 1-м борновском приближении:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\iiint_{R^3} d^3V(\bar{r})\, U(\bar{r})\, e^{i\bar{q}\bar{r}} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \cdot U(r)\, e^{iqr\cos\theta}$$

(мы считаем ось z направленной вдоль $\bar{q}$, т.к. мы можем направить её в любую сторону) $\underset{\text{замена } \cos\theta = t}{=}$

$$= -\frac{m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr\, r^2 U(r) \int_{-1}^{1} dt\, e^{iqrt} = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{+\infty} dr \cdot r \cdot U(r) \sin qr \quad (1)$$

Эта формула верна для $\forall\, U(r)$! Подставим туда потенциал Юкавы:

$$f = \frac{2mg^2}{\hbar^2 q}\int_0^{+\infty} dr \cdot e^{-\alpha r} \sin(qr)$$

Интеграл берётся Вольфрамом, получается $f = \frac{2mg^2}{\hbar^2 q} \cdot \frac{q}{\alpha^2 + q^2}$, или, после сокращения на q $\frac{2mg^2}{\hbar^2(\alpha^2 + q^2)}$. Но нам бы вернуться от q к θ.

Вспоминаем, что $|q| = \frac{2p_i}{\hbar} \sin \theta/2$ из шага 2, подставляем и получаем амплитуду рассеяния: $f = \frac{2mg^2}{\hbar^2 \alpha^2 + 4p_i \sin(\theta/2)}$, а вспоминая формулу из шага 2, получаем дифференциальное сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = f^2 = \frac{4m^2 g^4}{[\hbar^2 \alpha^2 + 4p_i^2 \sin^2(\theta/2)^2]}$$

Осталось проверить условия применимости первого борновского приближения. Пишем, что $\varepsilon_{\text{B}} = \frac{2m}{h^2} \int_0^\infty U(r) r dr \ll 1$:

$$\varepsilon_B = \frac{2m}{\hbar^2} g^2 \int_0^{+\infty} e^{-\alpha r} dr = \frac{2mg^2}{\hbar^2 \alpha} << 1 \Rightarrow g^2 \text{ должно быть} << \frac{\hbar^2 \alpha}{2m}$$

Это и есть условие применимости первого борновского приближения.

У задачи про потенциал Юкавы есть интересное продолжение:

Отметим, что кулоновский потенциал $U = e^2/r$ можно рассматривать как частный случай п-л Юкавы $U(r) = -\frac{g^2}{r} e^{-\alpha r}$ при $g^2 = e^2$ и $\alpha \to 0$.

Давайте возьмём ответ для п-ла Юкавы:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = f^2 = \frac{4m^2 g^4}{[\hbar^2 \alpha^2 + 4p_i^2 \sin^2(\theta/2)]}$$

и подставим туда $g^2 = e^2$, $\alpha = 0$.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{4m^2 e^2}{16 p_i^2 \sin^4 \theta/2}.$$

Хм! $\frac{1}{\sin^4 \theta/2}$! Это же з-н Резерфорда!

Отметим, что для кулоновского потенциала борновское приближение неприменимо, казалось бы, совсем: $\frac{2m}{h^2} \int_0^\infty U(r) r dr = \frac{2m}{h^2} \int_0^\infty \frac{e^2}{r} r dr = \frac{2m}{h^2} \int_0^\infty e^2 dr$ -

интеграл расходится. Однако то условие было достаточным, но необходимым: оно может быть не выполнено, но нам может «повезти».

Мишень составная. Что усложнится?

Теперь рассмотрим класс задач с составной мишенью, где мишень – не точечная частица, а состоит из них:

Тогда $V = \sum\limits_{i} V(\bar{r} - \bar{r}_i)$

по частицам мишени

от каждой частицы мишени

в непрерывном случае $V = \iiint\limits_{V_{\text{мишени}}} dV(\bar{r}')\, V(\bar{r} - \bar{r}')\, \rho(\bar{r}')$

Тогда формула для амплитуды рассеяния чуть усложнится:
вместо

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \iiint\limits_{R^3} d^3V(\bar{r})\, U(\bar{r})\, e^{i\bar{q}\bar{r}}$$

придётся расписать потенциал $U(\vec{r})$:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \iiint dV(\vec{r}) \underbrace{\iiint dV(\vec{r}')\, V(\bar{r} - \bar{r}')\, \rho(\bar{r}')}_{U(r) \text{ от всей мишени}} e^{i\bar{q}\bar{r}}$$

Сделав замену переменной интегрирования в интеграле $\bar{R} = \bar{r} - \bar{r}'$, получим

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \iiint\limits_{R^3} dV(\vec{R})\, V(\vec{R})\, e^{i\bar{q}\bar{R}} \cdot \underbrace{\iiint\limits_{R^3} dV(\bar{r}')\, \rho(\bar{r}')\, e^{i\bar{q}\bar{r}'}}_{\text{форм-фактор}}$$

Очень похоже на то, что у нас было:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \iiint\limits_{R^3} d^3V(\bar{r})\, U(\bar{r})\, e^{i\bar{q}\bar{r}}$$

только добавлился дополнительный множитель, который называется форм-фактором. Он зависит от структуры мишени. Поэтому и форм-фактор – он зависит от ФОРМЫ (мишени).

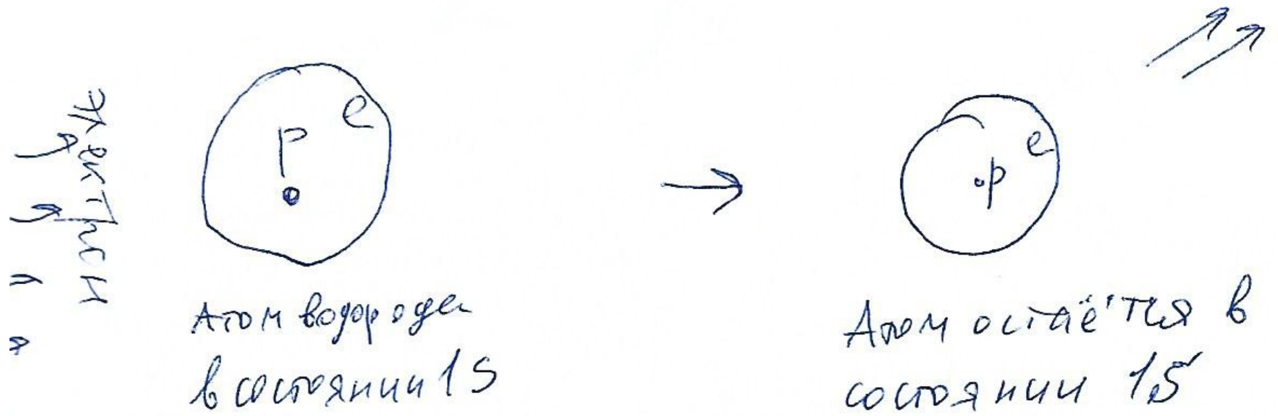
Наверняка вам рассказывали про сложную структуру нейтрона: в каких-то областях он отрицательно заряженный, в каких-то положительно. Вот это всё как раз получалось через формфактор: люди пинали нейтрон пучком электронов, получали экспериментально дифференциальное сечение рассеяния, считали формфактор, а потом узнавали объёмную плотность ρ(r) в мишени обратным Фурье-преобразованием: т.к. форм-фактор есть прямое преобразование Фурье

$$\text{форм-фактор}(\vec{q}) = \iiint_{R^3} dV(\vec{r}\,')\, \rho(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{q}\vec{r}\,'}$$

то объёмная плотность получается обратным:

$$\rho(r') = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{R^3} \text{форм-фактор}(\vec{q})\, e^{-i\vec{q}\vec{r}\,'}\, dV(\vec{q})$$

Решим задачу:



На атом водорода в состоянии 1s налетает электрон. После рассеяния водород остаётся в состоянии 1s. Диф.сечение рассеяния?

У нас уже есть $f = \dfrac{me^2}{2p_i^2 \sin^2(\theta/2)} \cdot F$ (давайте называть форм-фактор обозначим как F)

Считаем форм-фактор:

$$F = \iiint dV(r)\, e^{iqr} \{ \underbrace{\delta(\vec r)}_{\text{точечный протон}} - \underbrace{\frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}}_{|ВФ|^2\ 1s\text{-электрона}} \}, \quad \rho(\vec r)$$

Берём интеграл, переходя в сферическую СК. Опять направляя ось z вдоль $\vec{q}$, получим

$$F = 1 - \frac{1}{\pi a^3}\int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot e^{iqr\cos\theta} \cdot e^{-2r/a} =$$

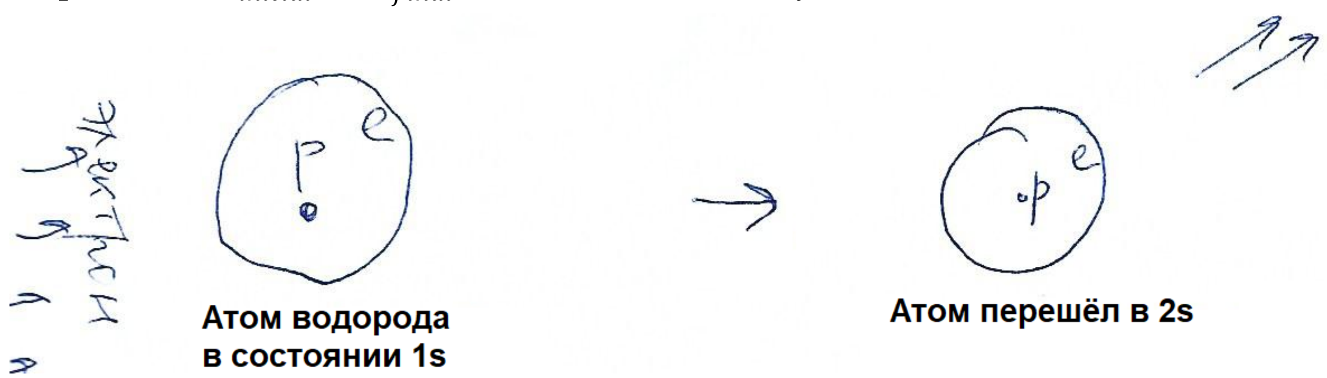
$$= 1 - \frac{2}{a^3}\cdot\frac{2}{q}\underbrace{\int_0^\infty dr \cdot r \cdot e^{-2r/a} \sin(qr)}_{= \frac{q^2}{4(1+q^2a^2)}}$$

Подставляем форм-фактор в амплитуду рассения:

$$f = \frac{me^2}{2p_1^2 \sin^2\theta/2}\left\{1 - \frac{1}{\left[1 + \frac{4p_i^2 a^2}{\hbar^2}\sin^2(\theta/2)\right]^2}\right\}$$

Неупругое рассеяние

Ранее мы решали задачи лишь на упругое рассеяние – когда энергия частицы сохраняется, $E_{initial} = E_{final}$. Однако бывают ситуации, что это не так:



Что изменится?

1) Изменится формула для упругого рассеяния

$$\frac{\text{б}\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2 * \frac{p_f}{p_i}$$

Появится отношение final конечного к начальному initial импульса. Можно видеть, что конечная формула превращается в $\frac{б\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2$ в случае упругого столкновения, когда $|f(\theta)|^2 = 1$.

2) Конечно, сюда

Считаем форм-фактор:

$$F = \iiint dV(r)\, e^{i\vec{q}\vec{r}} \overbrace{\left\{ \underbrace{\delta(\vec{r})}_{\text{точечный протон}} - \underbrace{\boxed{\frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}}}_{|ВФ|^2\ 2s\text{-электрона}} \right\}}^{\rho(\vec{r})}$$

надо будет подставлять квадрат модуля уже ВФ 2s-состояния.

А в основном решение будет то же, что и в предыдущей задаче.

Заметим, что энергия может как передаваться мишени (как в прошлой задаче), так и отдаваться (это сложнее осуществить: это электрон должен «попасть» в возбуждённый атом и снять возбуждение, взяв энергию на себя). Первым случаем много занимался физик Стокс, поэтому это рассеяние называется стоксовым, а второе, немного неуважительно к Стоксу, называется антистоксовым.

В заключение напомним, что это всё первое борновское приближение. Второе считают редко в силу резко усложняющихся выкладок и только в случае, когда первое дало удовлетворительный результат, но его хотелось бы уточнить. Если первое дало плохой результат, то второе вам не поможет. Так сказал Парфёнов ☺