Краткие сообщения по физике № 8 август 1973

НОРМИРОВКА АМПЛИТУДЫ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

И. Л. Бейгман

УДК 539.186

Предлагается метод нормировки амплитуды эффективных сечений в импульсном представлении. Метод дает результаты, аналогичные методу R-матрицы, но значительно проще в вычислительном отношении.

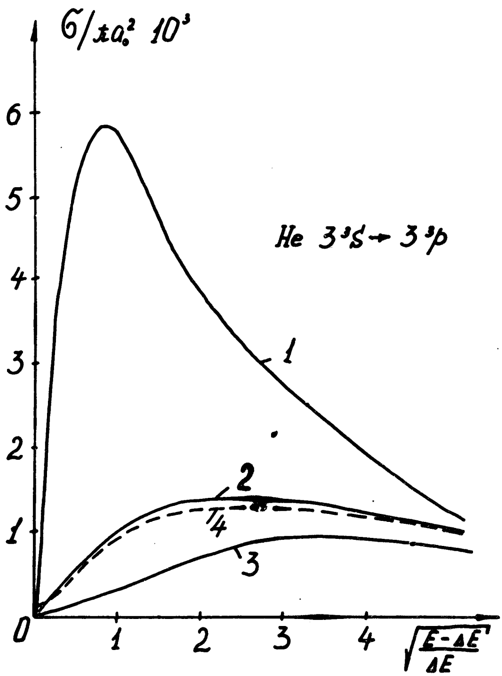
Для переходов между близкими уровнями борновское приближение часто дает качественно неверные результаты из-за нарушения закона сохранения числа частиц в процессе столкновения. В рамках "обобщенного метода Борна" /I/ этот эффект исправляется "нормировкой" амплитуды рассеяния с помощью R-матрицы, предложенной в /2/. Метод R-матрицы сформулирован в представлении моментов, что приводит к значительному усложнению расчетов.

В настоящей работе предлагается метод нормировки в импульсном представлении, аналогичный квазиклассической процедуре

$$C(\rho) = \frac{c(\rho)}{(1 + |c(\rho)|^2)^{1/2}}, \tag{I}$$

где $C(\rho)$, $c(\rho)$ - "нормированная" и "ненормированная" амплитуды, соответственно, ρ - прицельный параметр.

В работе /3/ было получено интегральное соотношение между квазиклассической амплитудой и квантовомеханической амплитудой в импульсном представлении. Используя это соотношение, можно из борновской амплитуды $f(q)$ получить соответствующую квазиклассическую амплитуду $c(\rho)$, нормировать ее, например, согласно (I), а затем снова вернуться к импульсному представлению. Для "нормированной" амплитуды в импульсном представлении $F(q)$ такая процедура дает (q – переданный импульс, v_0 – скорость)



Р и с. I. Сечение перехода $3^3S \rightarrow 3^3P$ при столкновениях атома He с электронами. I – метод Борна; 2 – метод R-матрицы; 3 – формулы (3), (4); 4 – квазиклассический расчет /5/.

$$F(q) = \frac{i}{2} q^2 v_0 \hat{L} C(\rho) = q^2 \hat{L} \left\{ M/(1 + (4/v_0^2)|M|^2)^{1/2} \right\},$$

$$\hat{L} C(\rho) \equiv \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{\rho}}}{2\pi} C(\rho) d^2\vec{\rho}, \quad M = \hat{L}^{-1}(f(q)/q^2) \qquad (2)$$

($f(q)$ – "ненормированная" квантовомеханическая амплитуда).

Интегральный оператор $\hat{L}$ переводит область малых ρ в область больших q и наоборот, причем степенной функции $1/\rho^n$ соответствует функция q^{n-2}. Аналогичными общими свойствами обладает локальное преобразование

$$\hat{L}'\varphi(y) = (b/x)^2\varphi(b/x), \quad (\hat{L}')^{-1}(1/y^2)\varphi(y) = \varphi(b/x).$$

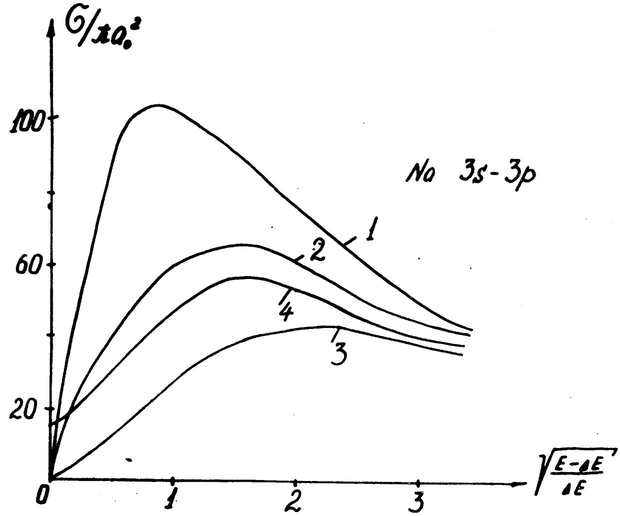


Рис. 2. Сечение перехода $3s \to 3p$ при столкновениях атома Na с электронами. I – метод Борна; 2 – метод R-матрицы; 3 – формулы (3), (4): 4 – квазиклассический расчет /5/.

Учитывая сказанное, а также значительный элемент произвола в выражении (I), заменим в формуле (2) $\hat{L}$ на $\hat{L}'$

$$F(q) = \frac{f(q)}{\left(1 + (4/v_0^2)|f(q)|^2\right)^{1/2}}, \qquad \sigma = \frac{8\pi}{k_0^2}\int\limits_{k_0-k_1}^{k_0+k_1} |F(q)|^2 \frac{dq}{q^3}, \tag{3}$$

$$f(q) = \langle 1|e^{i\vec{q}\vec{r}}|0\rangle, \tag{4}$$

σ – эффективное сечение, k_0, k_1 – импульсы падающего и рассеянного электронов соответственно. Формулы (3) написаны в атомных единицах. Отметим, что в (3) не входит константа b.

На рис. I,2 приведены сечения переходов $3^3S - 3^3P$ в атоме He и $3s - 3p$ в атоме Na, вычисленные по формулам (3), (4) и методом R-матрицы с помощью комплекса программ для "обобщенного метода Борна" /3/.

Для сравнения на рисунках приведены также результаты квазиклассического расчета с нормировкой по формулам (I), выполненного в работе (5). Различие указанных процедур нормировки в общем находится в рамках "стандартной погрешности" обобщенного метода Борна и значительно меньше отличия от сечения, вычисленного в обычном борновском приближении. Следует отметить, что процедура нормировки в импульсном представлении представляет особый интерес в тех случаях, когда методы вычисления сечений не сформулированы в представлении моментов.

Автор признателен Л. А. Вайнштейну, А. М. Урнову, В. П. Шевелько и В. И. Очкуру за обсуждение работы.

Поступила в редакцию
30 мая I973 г.

Литература

I. Л. А. Вайнштейн. Труды ФИАН, 5I, 3 (I969).
2. M. J. Seaton. Proc. Phys. Soc., 77, 184 (1961).
3. А. В. Виноградов. Опт. и спектр., 22, 663 (I967).
4. Л. А. Вайнштейн, В. П. Шевелько. Препринт ФИАН № 87, I970 г.
5. L. A. Vainshtein, A. V. Vinogradov. J. Phys. B, 3, 1090 (1970).