Краткие сообщения ОИЯИ № 1(58)-93 *JINR Rapid Communications № 1(58)-93*
УДК 539.171

РАССЕЯНИЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ

С.И.Федотов

Получены выражения для дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяний нерелятивистских тяжелых ионов на основе техники фейнмановских интегралов по путям. Внутренние возбуждения ядер и их относительное движение рассматриваются в едином подходе. По внутренним переменным точно берется континуальный интеграл, по траектории относительного движения он вычисляется в квазиклассическом приближении в рамках метода стационарной фазы.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Scattering of Nonrelativistic Heavy Ions

S.I.Fedotov

Expressions for a differential cross section of an elastic and inelastic scattering of nonrelativistic heavy ions are derived by using the technique of Feynman's path integrals. Internal excitations of nuclei and their relative motion are considered in a unique approach. The continual integral is exactly taken over internal variables whereas over the trajectory of relative motion it is calculated in the quasiclassical approach in the framework of the stationary phase method.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

При описании рассеяния нерелятивистских тяжелых ионов используются приближенные квазиклассические методы, основанные на малости длины волны де Бройля этих ионов по сравнению с характерными размерами [1]. Обычно для описания относительного движения ядер употребляется классическое дифференциальное сечение, а амплитуда перехода ядра считается в квантовомеханических приближениях. В данной работе рассматривается единый подход к внутренним и внешним переменным, основанный на фейнмановских интегралах по путям. Выделим только коллективные возбуждения фононного типа в ядрах. Рассматриваем столкновение иона с ядром как сложную квантовомеханическую систему. Введем в тензорном пространстве состояний этой системы базисные векторы $|\mathbf{r}n\rangle = |\mathbf{r}\rangle|n\rangle$ и $\langle \mathbf{r}n|\mathbf{r}'n'\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta_{nn'}$, где $|\mathbf{r}\rangle$ — собственные векторы оператора координаты относительного движения, а $|n\rangle$ — собственные векторы оператора числа фононов.

Выберем гамильтониан системы в следующем виде:

$$H = H_1 + H_2 + H_{12}, \qquad (1)$$

где $H_1 = \frac{1}{2}\mu \dot{\mathbf{r}}^2 + U_0(\mathbf{r})$ описывает относительное движение, $H_2 = \sum\limits_{nlm} \hbar\omega_{nl}\left(b^+_{nlm} b_{nlm} + 1/2\right)$ — внутренние возбуждения ядер, $H_{12} = \sum\limits_{nlm} \gamma_{nlm}(r(t))\left(b^+_{nlm} + (-)^m b_{nlm}\right)$ — взаимодействие внешнего движения с внутренним. В зависимости от конкретных расчетов учитывается ядерное или кулоновское взаимодействие, или то и другое вместе.

Следуя концепции континуальных интегралов Фейнмана [2], будем описывать временную эволюцию системы пропагатором $K(\mathbf{r}_f n_f t_f | \mathbf{r}_i n_i t_i) = \langle \mathbf{r}_f n_f t_f | \mathbf{r}_i n_i t_i \rangle$. Тогда волновую функцию системы можно записать в виде:

$$\psi\left(\mathbf{r}_f n_f t_f\right) = \langle \mathbf{r}_f n_f t_f | \psi_\Gamma \rangle =$$

$$= \sum_{n_i} \int \langle \mathbf{r}_f n_f t_f | \mathbf{r}_i n_i t_i \rangle \langle \mathbf{r}_i n_i t_i | \psi_\Gamma \rangle \, d\mathbf{r}_i =$$

$$= \sum_{n_i} \int \langle \mathbf{r}_f n_f t_f | \mathbf{r}_i n_i t_i \rangle \psi\left(\mathbf{r}_i n_i t_i\right) d\mathbf{r}_i, \qquad (2)$$

где использована полнота ортонормированного базиса системы, а $|\psi_\Gamma\rangle$ — вектор состояния в гейзенберговском представлении.

Чтобы воспользоваться техникой континуального интегрирования для внутренних переменных, так же, как и для относительной координаты, перейдем к базису непрерывного представления по когерентным состояниям. Этот базис является переполненным, с условием полноты: $1 = \frac{1}{\pi}\int d^2 z \, |z\rangle\langle z|$.

Ограничимся только одной степенью свободы и запишем пропагатор $\langle \mathbf{r}_f n_f t_f | \mathbf{r}_i n_i t_i \rangle$ в следующем виде:

$$\langle \mathbf{r}_f n_f t_f \mid \mathbf{r}_i n_i t_i \rangle =$$

$$= \int d^2 z_f d^2 z_i \, \langle n_f \mid z_f \rangle \, \langle \mathbf{r}_f z_f t_f \mid \mathbf{r}_i z_i t_i \rangle \, \langle z_i \mid n_i \rangle. \quad (3)$$

Чтобы освободиться от фононных амплитуд b^+, b, вычислим в пропагаторе $\langle \mathbf{r}_f z_f t_f \mid \mathbf{r}_i z_i t_i \rangle$ континуальный интеграл по всем возможным «траекториям» z, взяв в гамильтониане H слагаемые, в которые входят амплитуды, т.е. $H_0(t) = H_2 + H_{12}$. Используя факт, что когерентные состояния являются собственными состояниями оператора b, т.е. $b \mid z \rangle = z \mid z \rangle$, и проводя N-кратное интегрирование по z, получаем выражение:

$$\langle z_f t_f \mid z_i t_i \rangle = \exp \Big\{ \bar{z}_f z_i e^{i\omega(t_f - t_i)} -$$

$$- \frac{1}{\hbar} \left[\bar{z}_f e^{-i\omega t_f} \int_{t_i}^{t_f} e^{i\omega t} \gamma_{nlm}(t)\, dt + z_i e^{i\omega t_i} \int_{t_i}^{t_f} e^{-i\omega t} \bar{\gamma}_{nlm}(t)\, dt \right] -$$

$$- \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_i}^{t_f} ds \int_{t_i}^{s} \bar{\gamma}_{nlm}(s) \gamma_{nlm}(t)\, e^{i\omega(t-s)}\, dt \Big\}. \quad (4)$$

Подставив полученное выражение в (3) и проинтегрировав по z_i и z_f, находим:

$$\langle \mathbf{r}_f n_f t_f \mid \mathbf{r}_i n_i t_i \rangle = \langle \mathbf{r}_f \mid e^{-i/\hbar\,(\frac{1}{2}\mu \dot{\mathbf{r}}^2 - U_0(\mathbf{r}))}\, T_{n_f n_i}[\mathbf{r}] \mid \mathbf{r}_i \rangle, \quad (5)$$

где

$$T_{n_f n_i}[\mathbf{r}] = \left[\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \gamma_{nlm}(t)\, e^{i\omega(t - t_f)} \right]^{n_f} \frac{1}{\sqrt{n_f!}}\, e^{-\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_i}^{t_f} ds \int_{t_i}^{s} \bar{\gamma}_{nlm}(s) \gamma_{nlm}(t)\, e^{i\omega(t-s)} dt}$$

является амплитудой вероятности перехода $n_i \to n_f$, т.е. пропагатором в представлении чисел заполнения, вычисленным при фиксированном значении $\mathbf{r}\,(t)$. Эта амплитуда зависит от выбора траектории, поэтому и записана в виде функционала от $\mathbf{r}\,(t)$.

Таким образом, пропагатор $\langle \mathbf{r}_f n_f t_f \mid \mathbf{r}_i n_i t_i \rangle$, описывающий рассеяние, соответствующее переходу $n_i \to n_f$, представляется в виде фейнмановского интеграла по траектории $\mathbf{r}\,(t)$; обозначим его через $K_{n_f n_i}$ и представим в виде:

$$K_{n_f n_i} = \int\limits_{\mathbf{r}_i t_i}^{\mathbf{r}_f t_f} \mathrm{D}\,\mathbf{r}\exp\left\{i/\hbar\left(S_0\,[\mathbf{r}] + \varphi_{n_f n_i}\,[\mathbf{r}]\right)\right\}\left|T_{n_f n_i}\,[\mathbf{r}]\right|, \qquad (6)$$

где $S_0\,[\mathbf{r}] = \int\limits_{t_i}^{t_f}\left(\frac{1}{2}\mu\,\dot{\mathbf{r}}^2 - U_0(\mathbf{r})\right)dt$ — классическое действие вдоль траектории, т.е. получаем модифицированную функцию действия для системы. Ее изменение обусловлено взаимодействием с внутренними степенями свободы ядра. Если рассеяние удовлетворяет условию

$$(S_0\,[\mathbf{r}] + \varphi_{n_f n_i}\,[\mathbf{r}]) >> \hbar,$$

можно воспользоваться квазиклассическим приближением для интеграла (6). Подынтегральное выражение представляет собой комплексный функционал от траектории $\mathbf{r}\,(t)$ с быстро осциллирующей фазой. Интеграл берется в приближении стационарной фазы, согласно которому основной вклад в него дают траектории, делающие фазу стационарной:

$$\delta\,(S_0\,[\mathbf{r}] + \varphi_{n_f n_i}\,[\mathbf{r}]) = \delta\,(S_0\,[\mathbf{r}] + \hbar\,\mathrm{Im}\ln T_{n_f n_i}\,[\mathbf{r}]) = 0\,. \qquad (7)$$

Если имеется несколько таких траекторий, то квазиклассический пропагатор представляется суммой по ним:

$$K_{n_f n_i} = \sum_\alpha\left(\frac{\mu}{2\pi h i}\right)^{3/2}\sqrt{\left|\frac{\partial^2 S_\alpha}{\partial\mathbf{r}_f/\partial\mathbf{r}_i}\right|}\cdot \mathrm{e}^{\left(i/\hbar\, S_\alpha - \frac{1}{2}\nu\pi i\right)}\; T_{n_f n_i}\,[\mathbf{r}_\alpha] =$$

$$= \sum_\alpha\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar i}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{\left|\partial\,\mathbf{r}_f/\partial\,\dot{\mathbf{r}}_i\right|}}\cdot \mathrm{e}^{\left(i/\hbar\, S_\alpha - \frac{1}{2}\nu\pi i\right)}\; T_{n_f n_i}\,[\mathbf{r}_\alpha], \qquad (8)$$

где ν — число фокальных точек вдоль классической траектории, т.е. когда якобиан $\left(\frac{\partial\,\mathbf{r}_f}{\partial\,\dot{\mathbf{r}}_i}\right) = 0$. Определив $K_{n_f n_i}$, мы полностью определили волновую функцию системы (2).

Для определения сечения рассеяния необходимо найти асимптотическое значение (2). Предположим, что начальное состояние системы определяется функцией $\mathrm{e}^{i/\hbar\,(\mathbf{p}\,\mathbf{r}_i - E_i t)}$, соответствующей относительному движению иона и ядра. Тогда

$$\Psi^{+}_{n_f n_i}(\mathbf{r}_f t_f) = \int K_{n_f n_i}\, e^{i/\hbar(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_i - E_i t)}\, d\,\mathbf{r}_i\,. \tag{9}$$

Верхний индекс у волной функции $\Psi^{+}_{n_f n_i}(\mathbf{r}_f t_f)$ означает, что она соответствует волне, свободной при $t \to -\infty$, и, следовательно, отвечает «запаздывающему» пропагатору $K_{n_f n_i}(\mathbf{r}_f t_f \mid \mathbf{r}_i t_i)$.

Подставляя значение $K_{n_f n_i}$ из (8) и используя выражение $S_\alpha = \int \left(\mathbf{p}\, d\,\mathbf{r} - H\right) dt$, берем интеграл (9) многомерным методом стационарной фазы [3]:

$$\Psi^{+}_{n_f n_i} = \sum \frac{|t_i|^{3/2}}{\left|\partial \mathbf{r}_f / \partial \dot{\mathbf{r}}_i\right|^{1/2}}\, e^{i/\hbar \left(\mathbf{p}\,\mathbf{r}_i + \int_{r_i}^{r_f} \mathbf{p}\, d\,\mathbf{r} - \frac{1}{2}\nu\pi i\right)}\, T_{n_f n_i}[\mathbf{r}_\alpha]. \tag{10}$$

Рассмотрим две траектории при $\mathbf{r} \to \infty$. По первой траектории ион движется свободно с постоянным импульсом $\mathbf{p}$. В этом случае $\Psi^{+} \to e^{i/\hbar\, \mathbf{p}\mathbf{r}}$

Во втором случае ион взаимодействует с ядром. Принимая во внимание, что якобиан представляет собой отношение преобразующихся друг в друга элементов объема и что волновые векторы пропорциональны элементам длины, запишем:

$$\frac{|t|^{3/2}}{\left|\partial \mathbf{r}_f / \partial \dot{\mathbf{r}}_i\right|^{1/2}} = \frac{1}{\left|\partial \mathbf{r}_f / \partial \mathbf{r}_i\right|^{1/2}} = \sqrt{\frac{d v_i}{d v_f}} = \sqrt{\frac{\rho\, d\rho\, d\varphi\, k_i}{r^2\, d\Omega\, k_f}}\,;\ \lim_{t_i \to -\infty}\left(\frac{\mathbf{r}_i}{t_i} - \dot{\mathbf{r}}_i\right) = 0.$$

Окончательно волновая функция имеет вид:

$$\Psi^{+}_{n_f n_i}\left(\mathbf{r}_f t_f\right) = e^{i/\hbar\, \mathbf{p}\mathbf{r}} + \sqrt{\frac{\rho\, d\rho\, d\varphi}{d\Omega}\,\frac{k_i}{k_f}}\;\frac{e^{ikr}}{r}\; e^{i\chi}\, T_{n_f n_i}, \tag{11}$$

где χ — вещественная функция, вид которой для дальнейшего не важен. Отсюда получаем выражение для дифференциального сечения рассеяния в первом порядке квазиклассического приближения континуального интеграла (6):

$$\frac{d\sigma_{n_i \to n_f}}{d\Omega} = \sum_\alpha \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{кл} \left| T_{n_i n_f}[\mathbf{r}_\alpha]\right|^2, \tag{12}$$

где $\left(\dfrac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{кл}$ — дифференциальное сечение для классического движения вдоль траектории $\mathbf{r}(t)$, полученной из уравнения (7). $T_{n_f n_i}$ — соответствующая квантовая амплитуда вдоль того же пути. Эта амплитуда определяется в квазиклассической теории реакций с тяжелыми ионами путем решения системы линейных дифференциальных уравнений, к которым сводится уравнение Шредингера. Используется метод последовательных приближений. В практических расчетах обычно ограничиваются первым приближением, соответствующим первому порядку зависящей от времени теории возмущения.

В случае упругого рассеяния:

$$T_{n_f n_i} = e^{-\frac{1}{\hbar^2}\int\limits_{t_i}^{t_f} ds \int\limits_{t_i}^{s} \bar{\gamma}(s)\,\gamma(t)\, e^{i\omega(t-s)} dt} . \qquad (13)$$

Таким образом, в едином подходе к внешнему и внутреннему движению получены выражения для дифференциальных сечений, которые позволяют учесть интерференционные явления и в случае упругого рассеяния включают ослабляющий фактор (13).

Литература

1. Treatise on Heavy-Ion Science, Ed. Bromly, Plenum Press. N.-Y., 1984.
2. Pechukas P. — Phys. Rev., 1969, v.181, p.166, 174.
3. Федорюк М.В. — Метод перевала. М.: Наука, 1977.

Рукопись поступила 28 октября 1992 года.