И Н С Т И Т У Т
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

И Я Ф 46 - 72

А.П.Кольченко, С.Г.Раутиан, А.М.Шалагин

ЯДРО ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ

Новосибирск

1972

А.П.Кольченко, С.Г.Раутиан, А.М.Шалагин

ЯДРО ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ

АННОТАЦИЯ

Получены общие выражения, связывающие ядро интеграла столкновений с дифференциальным сечением рассеяния. Вводится понятие одномерного ядра и одномерной частоты столкновений и выясняются их общие свойства. Выводы иллюстрируются на некоторых частных видах потенциала взаимодействия. Основное внимание уделено рассеянию с малым изменением скорости.

1. ВВЕДЕНИЕ

Характерной особенностью многих газовых систем, находящихся в сильном электромагнитном поле, является резкая неравномерность распределения атомов по скоростям . Это обстоятельство сказывается в форме лэмбовского провала, в ряде эффектов нелиной спектроскопии и т.д. Разнообразные релаксационные процессы могут в той или иной мере деформировать распределение по До последнего времени интерпретация наблюдаемых данных проводилась в рамках двух моделей: модели релаксационных констант и модели сильных столкновений. Между тем, совершенно общие физические соображения говорят о том, что в указанных условиях должны проявляться и столкновения с малым изменением скорости (модель слабых столкновений /1,2/). действительно, в модели релаксационных констант учитывается тушение и сбой фазы атомного осциллятора (Вайскопфовский механизм уширения, см.,например,/3/. Известно, однако, что сбой фазы и упругое рассеяние тесно связаны между собой: если, например, возмущается лишь одно из комбинирующих состояний, то сечение уширения линии равно половине полного сечения рассеяния (/3/, стр.500). Из сказанного ясно, что сбой фазы сопровождается, по крайней, мере, дифракционной неопределенностью скорости, равной по порядку величины:

$$\frac{\Delta v}{\bar{v}} \sim \frac{\lambdabar}{\rho_B} = \frac{\hbar}{m \rho_B \bar{v}} \sim 5 / \tilde{\rho}_B \sqrt{M T\,^\circ K} \qquad (1.1)$$

Здесь $\lambdabar$ -длина волны де-Бройля; ρ_B -радиус Вайскопфа; $m, \bar{v}$ - масса и скорость атома. В последнем равенстве $\tilde{\rho}_B$ есть ρ_B в $\mathring{A}$, а M -атомный вес. Для типичных значений (M =20, T=400°K, ρ_B=5$\mathring{A}$) имеем $\Delta v/\bar{v} \sim 10^{-2}$. Такой же порядок величины имеет и отношение ширины провала Беннета к ширине максвелловского распределения . Это означает, что минимально малое изменение скорости может приводить к уширению провалов Беннета в той же мере,что и сбой фазы атомного осциллятора. Возможность нескольких столкновений за время жизни и "рассеяния на классические углы" еще более усилит эффект слабых столкновений. Таким, образом, Вайскопфовский механизм уширения и диффузия атомов в пространстве скоростей и по существу дела, и по числовым параметрам должны одновременно учитываться при анализе нелинейных явлений в газах.

Для описания всех интересующих нас процессов можно использовать систему уравнений /2/ для элементов ρ_{ij} матрицы плотности:

$$(\partial/\partial t+\vec{v}\nabla+\Gamma_j)\rho_{jj}=\pm 2\,\mathrm{Re}[iV^{*}_{mn}\rho_{mn}]+q_j+S_j\,;\quad j=m,n;$$

$$(\partial/\partial t+\vec{v}\nabla+\Gamma)\rho_{mn}=iV_{mn}[\rho_m-\rho_n]+S\,;$$

$$S_j=-\nu_j\rho_{jj}+\int A_j(\vec{v}',\vec{v})\rho_{jj}(\vec{r},\vec{v}',t)\,d\vec{v}'; \tag{1.2}$$

$$S=-\nu\rho_{mn}+\int A(\vec{v}',\vec{v})\rho_{mn}(\vec{r},\vec{v}',t)\,d\vec{v}';\qquad V_{mn}=V_{mn}(\vec{r},t).$$

Здесь q_j –скорость возбуждения атомов в состояние j, $\vec{v}$; $A_j(\vec{v}',\vec{v})$, $A(\vec{v}',\vec{v})$ –ядра интегралов столкновений S_j, S; $V_{mn}(\vec{r},t)=(d_{mn}/\hbar)E(\vec{r},t)e^{i\omega_{mn}t}$– матричный элемент взаимодействия с внешним полем. Специфическая особенность уравнений (1.2), отличающая их от хорошо исследованных уравнений кинетической теории газов, связана с динамическими членами (с $V_{mn}(\vec{r},t)$), которые, в частности, и обуславливают существенно неравновесный характер стационарных решений. Поэтому методы и представления, возникающие при исследовании явлений типа теплопроводности, диффузии и т.п., оказываются неадекватными в задачах нелинейной спектроскопии. Проявляется это, прежде всего, в том, что в этих задачах основными характеристиками релаксационных процессов служат непосредственно ядра столкновений, а не их первые моменты, как в кинетической теории. Этот качественный вывод, вытекающий из общих соображений, подтверждается и анализом ряда конкретных задач /1,2,4–8/.

Данная работа посвящена исследованию ядра диагонального интеграла столкновений в (1.2). В разделе 2 выясняются некоторые общие свойства ядра, не связанные с конкретным видом дифференциального сечения рассеяния. В разделах 3–5 рассмотрены три конкретные модели, представляющие интерес в случае атом–атомных столкновений.

2. Ядро $A_j(\vec{v}';\vec{v})$ диагонального интеграла столкновений.[1]

Ядро $A(\vec{v}';\vec{v})$ связано с дифференциальным сечением следующим образом:

$$A(\vec{v}';\vec{v}) = 2\int \sigma(\vec{u}';\vec{u}) f_a(\vec{v}_a{}') \delta(\vec{V}-\vec{V}') \delta(u^2-u'^2) d\vec{v}_a d\vec{v}_a{}' ; \quad (2.1)$$

$$\vec{V} = \frac{m\vec{v}+m_a\vec{v}_a}{m+m_a};\ \vec{V}' = \frac{m\vec{v}'+m_a\vec{v}_a{}'}{m+m_a};\ \vec{u} = \vec{v}-\vec{v}_a;\ \vec{u}' = \vec{v}'-\vec{v}_a{}'$$

Здесь m_a, $\vec{v}_a$, $\vec{v}_a{}'$ – масса и скорости возмущающей частицы до и после столкновений; $\vec{V}$, $\vec{V}'$, $\vec{u}$, $\vec{u}'$ – скорости центра инерции и относительные скорости; функция $f_a(\vec{v}_a{}')$ задает распределение возмущающих частиц по $\vec{v}_a{}'$, принимаемое в дальнейшем за Максвеллово

$$f_a(\vec{v}_a) = N_a W_a(\vec{v}_a),\ W_a(\vec{v}_a) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}\,\bar{v}_a)^3} e^{-(\vec{v}_a/\bar{v}_a)^2};\ \bar{v}_a{}^2 = \frac{2kT_a}{m_a}. \quad (2.2)$$

δ – функции, содержащиеся в (2.1), отражают законы сохранения импульса и энергии. Рис.1 иллюстрирует соотношение между различными векторами. Угол ϑ между $\vec{u}'$ и $\vec{u}$ есть обычный угол рассеяния. Более удобной переменной является вектор $\vec{u}_o = (\vec{u}+\vec{u}')/2$. Действительно, в силу законсв сохранения имеем

$$\vec{V}'-\vec{V} = \vec{\xi} - (\mu/m)(\vec{u}'-\vec{u}) = 0;\ \vec{\xi} = \vec{v}'-\vec{v};\ \vec{u}_o = (\vec{u}'+\vec{u})/2;$$

$$\vec{u}' = \vec{u}_o + (m/2\mu)\vec{\xi};\ \vec{u} = \vec{u}_o - (m/2\mu)\vec{\xi};\ u_o = (\xi/2)\,ctg\frac{\vartheta}{2};$$

$$u'^2 - u^2 = (\vec{u}'+\vec{u})(\vec{u}'-\vec{u}) = 2(m/\mu)\vec{\xi}\vec{u}_o,\ \mu = \frac{m m_a}{m+m_a}. \quad (2.3)$$

Вектор $\vec{u}_o$ ортогонален к $\vec{\xi}$, а фиксация величины $\vec{\xi}$ фиксирует и разность $\vec{u}'-\vec{u}$. Учтем также, что в случае центральных

---

1) Индекс j в дальнейшем опускаем.

сил, (которые только и рассматриваются ниже), дифференциональное сечение зависит от $|\vec{u}|$ и угла ϑ. Будем считать поэтому $\sigma(\vec{u}',\vec{u})$ функцией от $|\vec{u}|$ и $|\vec{u}'-\vec{u}|$, сохраняя прежнее обозначение: $\sigma(u, |\vec{u}'-\vec{u}|)$. Интегрируя по углу φ (рис.1) и используя δ-функции, получим из (2.1):

$$A(\vec{v}',\vec{v}) = (m/\mu)^2 \xi^{-1} \int \sigma(u, m\xi/\mu) f_a(\vec{v}' - m\vec{\xi}/2\mu - \vec{u}_0)\, d\vec{u}_0 =$$

$$= N_a \bar{v}_a\, a(\vec{v}-\gamma\vec{v}') \cdot \frac{\alpha \bar{v}}{\xi} \frac{8\pi}{\bar{v}_a^2} \int_0^\infty \sigma(u, m\xi/\mu) I_0(2\xi u_0/\bar{v}_a^2) \cdot \qquad (2.4)$$

$$\cdot \exp[-u_0^2/\bar{v}_a^2]\, u_0\, du_0;$$

$$u^2 = u_0^2 + (m\xi/2\mu)^2; \; \gamma = (m-m_a)/(m+m_a); \; \alpha^2 = \left(\frac{2\mu \bar{v}_a}{m\bar{v}}\right)^2 =$$

$$= \frac{4 m m_a}{(m+m_a)^2} \frac{T_a}{T}; \; \xi^2 = v^2 - (\vec{\xi}\vec{v}/\xi)^2;$$

$$a(\vec{v}-\gamma\vec{v}') = (\sqrt{\pi}\alpha\bar{v})^{-3} \exp[-(\vec{v}-\gamma\vec{v}')^2/\alpha^2\bar{v}^2].$$

Здесь $I_0(z)$ -функция Бесселя нулевого порядка мнимого аргумента. Таким образом, ядро $A(\vec{v}',\vec{v})$ может быть найдено из дифференциального сечения с помощью одной квадратуры. Рассмотрим некоторые общие свойства $A(\vec{v}',\vec{v})$, вытекающие из (2.4).

Ядро $A(\vec{v}',\vec{v})$ имеет вид произведения функции $a(\vec{v}-\gamma\vec{v}')$ на множитель, симметричный относительно замены $\vec{v} \longleftrightarrow \vec{v}'$. Множитель $a(\vec{v}-\gamma\vec{v}')$ носит название ядра Кейлсона-Сторера; оно было предложено в /9/ для модельного описания[2)] ядра $A(\vec{v}',\vec{v})$. Формула (2.4) показываеет, что некоторые основания для такой аппроксимации существуют. Однако ясна и её ограниченность - ядро $a(\vec{v}-\gamma\vec{v}')$ никак не отражает специфику элементарного акта рассеяния. В случае же селективного рассеяния (т.е. преимущественного рассеяния с малыми $|\vec{v}'-\vec{v}|/\bar{v}$ (характер ядра $A(\vec{v}',\vec{v})$ определяется, главным образом, дифференциальным сечением $\sigma(u, m\xi/\mu)$, а не $a(\vec{v}-\gamma\vec{v}')$. Кроме того, реальное трехмерное ядро содержит сингулярность, тесно связанную с нали-

2) Точнее говоря, ядро a в (2.4) есть обобщение ядра Кейлсона-Сторера на случай различных температур ($T_a \neq T$).

чием δ -функции по энергии.

Легко проверить, что при $T = T_a$ имеет место соотношение

$$W(\vec{v}')\mathcal{A}(\vec{v}',\vec{v}) = W(\vec{v})\mathcal{A}(\vec{v},\vec{v}'), \qquad (2.5)$$

если $W(\vec{v})$ -максвелловское распределение. Из (2.5) следует

$$\int \mathcal{A}(\vec{v}',\vec{v})W(\vec{v}')d\vec{v}' = \nu(\vec{v})W(\vec{v}); \quad \nu(\vec{v}) = \int \mathcal{A}(\vec{v},\vec{v}')d\vec{v}', \qquad (2.6)$$

где $\nu(\vec{v})$ -частота "прихода" в интеграле столкновений. Таким образом, интеграл столкновений с ядром (2.4) оставляет равновесное распределение равновесным (с точностью до зависимости ν от $\vec{v}$).

С помощью (2.5) можно установить также следующее: если предположить, что ядро $\mathcal{A}(\vec{v}',\vec{v})$ зависит только от комбинации $\vec{v}-\gamma\vec{v}'$, то такое ядро с необходимостью Кейлсон-Стореровское.

Частота столкновений $\nu(\vec{v})$ может быть выражена через полное сечение рассеяния

$$\nu(\vec{v}) = \int \mathcal{A}(\vec{v},\vec{v}')d\vec{v}' = \int \sigma(u) f_a(\vec{v}-\vec{u})\, u\, d\vec{u};$$

$$\sigma(u) = \int \sigma(u, |\vec{u}'-\vec{u}|)\, do. \qquad (2.7)$$

Из (2.7) видно, что ν зависит от отношения $|\vec{v}|$ к среднетепловой скорости $\bar{v}_a$ возмущающих частиц. Обычно рассматриваемая средняя частота столкновений связана с ν формулой

$$\langle \nu \rangle = \int \nu(\vec{v})W(\vec{v})d\vec{v} = \frac{4N_a}{\sqrt{\pi}\,\bar{u}^3}\int_0^\infty \sigma(u)u^3 e^{-u^2/\bar{u}^2}du;$$

$$\bar{u}^2 = \bar{v}^2 + \bar{v}_a^2. \qquad (2.8)$$

Во многих моделях столкновений полное сечение зависит от u по степенному закону

$$\sigma(u) = \sigma(\bar{u})(\bar{u}/u)^n \tag{2.9}$$

Случай $n=0$ отвечает модели непроницаемых сфер, $n=2$ – Борновскому приближению ($\sigma(u, m\xi/\mu) = \sigma(m\xi/\mu)$), $n=1$ и $n=2/5$ – потенциалам взаимодействия сталкивающихся атомов типа $1/r^3$ и $1/r^6$. Из (2.7) для (2.9) имеем

$$\nu(\vec{v}) = \langle\nu\rangle(\bar{u}/\bar{v}_a)^{n-1}\Phi\left(\frac{n-1}{2}, \frac{3}{2}; -\frac{v^2}{\bar{v}_a^2}\right),$$
$$\langle\nu\rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\bar{u}N_a\sigma(\bar{u})\Gamma\left(2-\frac{n}{2}\right), \tag{2.10}$$

где $\Phi(\alpha, \gamma; z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция. В случае $n=0,1,2$ формула (2.10) даёт:

$$\nu(\vec{v}) = N_a\bar{v}_a\sigma(\bar{v}_a)\left\{e^{-z^2}/\sqrt{\pi} + \left(z+\frac{1}{2z}\right)\Phi(z)\right\}; \qquad n=0;$$

$$\nu(\vec{v}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}N_a\bar{v}_a\sigma(\bar{v}_a), \qquad n=1; \tag{2.11}$$

$$\nu(\vec{v}) = N_a\bar{v}_a\sigma(\bar{v}_a)z^{-1}\Phi(z), \quad z=|\vec{v}|/\bar{v}_a, \qquad n=2.$$

На рис.2 даны графики этих функций, а также график $\nu(\vec{v})$ для $n=2/5$ (кривые 1–4). Из рисунка видно, что в области $|\vec{v}| \leq \bar{v}_a$ зависимость ν от $|\vec{v}|$ сравнительно не сильная, т.к. возмущаемая частица практически неподвижна. При $|\vec{v}| \gg \bar{v}_a$ имеет место асимптотическое разложение

$$\nu(v) \cong N_a|\vec{v}|\sigma(\vec{v})\left[1+(n-1)(n-2)\frac{\bar{v}_a^2}{4|\vec{v}|^2}\right], \quad (|\vec{v}| \gg \bar{v}_a)$$
$$\nu(v) \equiv \nu(\vec{v}). \tag{2.12}$$

Здесь $\nu(v)$ определяется движением возмущаемой частицы.

Во многих конкретных ситуациях электромагнитное поле имеет вид плоской волны. Такое поле вызывает неравновесность распределения лишь для проекции скорости на волновой вектор $(v_{\parallel})$. Зависимость ν от v и "перенос" неравновесности на ортогональные компоненты $(\vec{v}_{\perp})$ скорости $\vec{v}$ делают неравновесным и распределение атомов по $\vec{v}_{\perp}$. Этот эффект во многих случаях не очень сильный, и тогда целесообразно рассматривать "одномерное" ядро:

$$A(v_{\parallel}',v_{\parallel}) = \int A(\vec{v}',\vec{v})\, W(\vec{v}_{\perp}')\, d\vec{v}_{\perp}'\, d\vec{v}_{\perp}. \tag{2.13}$$

$$\nu(v_{\parallel}) = \int A(v_{\parallel},v_{\parallel}')\, dv_{\parallel}' = \int \nu(v) W(\vec{v}_{\perp})\, d\vec{v}_{\perp}; \quad W(\vec{v}_{\perp}) = \frac{e^{-\frac{\vec{v}_{\perp}^2}{\bar{v}^2}}}{\pi \bar{v}^2} \tag{2.14}$$

С помощью несложных преобразований можно получить:

$$A(v_{\parallel}',v_{\parallel}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{\mu}\right)^2 \frac{N_a}{\bar{u}} \iint\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2-y^2}\, dx\, dy \int\limits_{|\xi_{\parallel}|/\sqrt{1+\beta^2}}^{\infty} \sigma(u, m\xi/\mu)\, e^{-\rho^2(z)}\, dz;$$

$$\rho(z) = mz/2\mu\bar{u} - \xi_{\parallel}(v_{\parallel}' - c\xi_{\parallel}/2)/z\bar{u}; \quad \xi^2 = z^2 + \frac{\beta^2 \xi_{\parallel}^2}{1+\beta^2}; \tag{2.15}$$

$$c = m\bar{v}^2/\mu\bar{u}^2; \quad \xi_{\parallel} = v_{\parallel}' - v_{\parallel}; \quad \beta = \bar{v}/\bar{v}_a, \quad \bar{u}^2 = \bar{v}^2 + \bar{v}_a^2;$$

$$\frac{u^2}{\bar{u}^2} = x^2 + \left[1 + \beta^2\xi_{\parallel}^2/z^2(1+\beta^2)\right]\left[y/\sqrt{1+\beta^2} + (v_{\parallel}' - c\xi_{\parallel}/2)\bar{u}^{-1}\sqrt{1 - \frac{\xi_{\parallel}^2}{z^2(1+\beta^2)}}\right]^2 + (m\xi/2\mu\bar{u})^2.$$

$$\nu(v_{\parallel}') = (N_a/\pi\sqrt{\pi}\,\bar{v}_a\bar{u}^2)\int \sigma(u)\cdot u \cdot \exp\left\{-\left[u_{\perp}^2/\bar{u}^2 - (u_{\parallel} - v_{\parallel}')^2/\bar{v}_a^2\right]\right\} d\vec{u};$$

$$\sigma(u) = (2\pi/u^2)(m/\mu)^2 \int\limits_0^{2\mu u/m} \sigma(u, \xi m/\mu)\,\xi\, d\xi. \tag{2.16}$$

Из (2.15) следуют некоторые общие свойства $A(v_{\parallel}', v_{\parallel})$. За независимые переменные целесообразно принять $v_{\parallel}'$ и $\xi_{\parallel} = v_{\parallel}' - v_{\parallel}$; скорость $v_{\parallel}'$ входит только в комбинации $v_{\parallel}' - c\xi_{\parallel}/2$; если температуры газов одинаковы, то $c = 1$ и $v_{\parallel}' - c\xi_{\parallel}/2 = (v_{\parallel}' + v_{\parallel})/2$. В точке $\xi_{\parallel} = 0$ ядро $A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel})$ имеет "излом" (нижний предел содержит $|\xi_{\parallel}|$), который становится все более тупым по мере увеличения β и при $\beta \to \infty$ исчезает совсем.

В общем случае $A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel})$ как функция $\xi_{\parallel}$ асимметрично относительно точки $\xi_{\parallel} = 0$, причем ядро имеет большие значения в области $v_{\parallel}'\xi_{\parallel} > 0$. Физически это эквивалентно эффективному торможению частицы; например, при $v_{\parallel}' > 0$ условие $v_{\parallel}'\xi_{\parallel} = v_{\parallel}'(v_{\parallel}' - v_{\parallel}) > 0$ означает преимущественное рассеяние в область с меньшими скоростями.

Особый интерес представляет селективное рассеяние, когда $m\xi/\mu\bar{u} \ll 1$, и эти члены можно отбросить:

$$A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel}) = (2N_a m^2/\sqrt{\pi}\,\bar{u}\mu^2) \iint\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2-y^2} dx\,dy \int\limits_{|\xi_{\parallel}|/\sqrt{1+\beta^2}}^{\infty} \sigma(u, m\xi/\mu) \tag{2.17}$$

$$\exp[-(\xi_{\parallel} v_{\parallel}'/z\bar{u})^2]\,dz\,; \quad \xi^2 = z^2 + \xi_{\parallel}^2\beta^2/(1+\beta^2);$$

$$\frac{u^2}{\bar{u}^2} = x^2 + (\xi/z)^2\left[y/\sqrt{1+\beta^2} + (v_{\parallel}'/\bar{u})\sqrt{1 - \xi_{\parallel}^2/z^2(1+\beta^2)}\right]^2.$$

В этом приближении $A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel})$ симметрично относительно точки $\xi_{\parallel} = 0$. Кроме того, зависимость ядра от $v_{\parallel}'$ значительно более плавная (характерный масштаб $\bar{u}$), чем от $\xi_{\parallel}$. Таким образом, в случае селективного рассеяния ядро можно считать разностным (зависящим от $v_{\parallel}' - v_{\parallel} = \xi_{\parallel}$) со слабой зависимостью от $v_{\parallel}'$. Для $\nu(v_{\parallel})$ приближение селективности означает, что верхний предел $2\mu u/m$ в выражении (2.16) для $\sigma(u)$ можно заменить на ∞.

Параметр $\beta = \bar{v}/\bar{v}_a$ входит в (2.17) в таких комбинациях, которые изменяются в пределах 0; 1 при $0 < \beta < \infty$. Поэтому селективное ядро мало чувствительно к изменению β. Основные же особенности ядра определяются дифференциальным сечением $\sigma(u, m\xi/\mu)$. Иллюстрируем это утверждение на следующем важном примере:

$$\sigma(u, m\xi/\mu) = \sigma_0 (u/\bar{u})^s F(\xi/f) \tag{2.18}$$

Под величиной f будем понимать характерную ширину дифференциального сечения (в шкале $\vec{v}, \vec{v}'$). Функцию $F(\xi, f)$ будем нормировать на $F(0) = 1$, так чтобы σ_0 имело смысл дифференциального сечения рассеяния вперед при $u = \bar{u}$. Модель (2.18) приводит в селективном случае к степенной зависимости $\sigma(u)$, т.е. отвечает модели (2.9):

$$\sigma(u) = 2\pi\sigma_0 (mf/\mu\bar{u})^2 (\bar{u}/u)^n \int_0^\infty F(\eta)\,\eta\, d\eta. \tag{2.19}$$

Для модели (2.18) из (2.17) следует:

$$A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel}) = (2\sqrt{\pi}\,\bar{u} N_a \sigma_0 / f)(mf/\mu\bar{u})^2 \Gamma\left(1 + \frac{s}{2}\right) \int_{\xi_{\parallel}/f}^{\infty} F(\eta)\, d\eta\,; \quad (\beta \ll 1, v_{\parallel}' \lesssim \bar{v}); \tag{2.20}$$

$$A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel}) = (2\bar{u} N_a \sigma_0 / f)(mf/\mu\bar{u})^2 \Gamma\left(\frac{1+s}{2}\right) \int_0^\infty F\left(\sqrt{\eta^2 + \xi_{\parallel}^2/f^2}\right) d\eta\,; \quad (\beta \gg 1, v_{\parallel}' \ll \bar{v}) \tag{2.21}$$

Итак, характерный масштаб ядра как функции $\xi_{\parallel}$ есть f. Интересно сопоставить $\nu(v_{\parallel}')$ и $A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel})$ при $\xi_{\parallel} = 0$.

$$A(v_{\parallel}', 0) = (2\sqrt{\pi} N_a \sigma_0 f/\bar{u})(m/\mu)^2 I_1(v_{\parallel}', \beta) \int_0^\infty F(\eta)\, d\eta\,;$$

$$\nu(v_{\parallel}') = 4\sqrt{\pi} N_a \sigma_0 \bar{u} (mf/\mu\bar{u})^2 I_2(v_{\parallel}', \beta) \int_0^\infty F(\eta)\,\eta\, d\eta\,; \tag{2.22}$$

$$\delta(v_{\parallel}', \beta) \equiv \nu(v_{\parallel}')/2A(v_{\parallel}', 0) = \langle\eta\rangle f\, I_2(v_{\parallel}', \beta)/I_1(v_{\parallel}', \beta)\,;$$

$$\langle\eta\rangle = \left(\int_0^\infty F(\eta)\,\eta\, d\eta\right) \Big/ \left(\int_0^\infty F(\eta)\, d\eta\right).$$

$$I_1 = \frac{1}{\pi}\iint\limits_{-\infty}^{\infty}\left[x^2+\left(y/\sqrt{1+\beta^2}+v_{\parallel}'/\bar{u}\right)^2\right]^{S/2} e^{-x^2-y^2}\,dx\,dy\,;$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} x e^{-x^2}dx \int_{-\infty}^{\infty}\left[x^2+\left(y/\sqrt{1+\beta^2}+v_{\parallel}'/\bar{u}\right)^2\right]^{(S-1)/2} e^{-y^2}dy. \tag{2.23}$$

Поскольку $\nu(v_{\parallel}')$ есть площадь под графиком $A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel})$ как функции $\xi_{\parallel}$, величина $\delta(v_{\parallel}', \beta)$ характеризует ширину ядра и в дальнейшем будет называться его эффективной шириной. При малых $v_{\parallel}'/\bar{u}$ имеем:

$$I_1(0,\beta) = \left[(1+\beta^2/2)/(1+\beta^2)\right]^{S/2}\Gamma\left(1+\frac{S}{2}\right){}_2F_1\left(-\frac{S}{4}, \frac{1}{2}-\frac{S}{4}; 1; \left[\frac{\beta^2}{2+\beta^2}\right]^2\right);$$

$$I_2(0,\beta) = \Gamma(1+S/2)\ {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1-S}{2}; \frac{3}{2}; \frac{\beta^2}{1+\beta^2}\right). \tag{2.24}$$

Легко показать, что гипергеометрическая функция в $I_1(0,\beta)$ изменяется в интервале 0,900; 1 при $0 < \beta < \infty$; $0 \leq S \leq 2$. В этой же области β, S функция ${}_2F_1$ в $I_2(0,\beta)$ изменяется в пределах $\pi/4 \div \pi/2$. Если же фиксировать S , то $\delta(v_{\parallel}', \beta)$ увеличивается в $\pi/2$ раз при переходе от $\beta = 0$ к $\beta \to \infty$. Таким образом, с точностью до множителя порядка единицы, $\delta(0,\beta)$ совпадает с шириной f дифференциального сечения. Если $v_{\parallel}'/\bar{u} >> 1$, то

$$I_1(v_{\parallel}',\beta) \cong (v_{\parallel}'/\bar{u})^S; \quad I_2(v_{\parallel}',\beta) \cong \frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{v_{\parallel}'}{\bar{u}}\right)^{S-1};$$

$$\delta(v_{\parallel}',\beta) \cong \frac{\sqrt{\pi}}{2} f\langle\eta\rangle(\bar{u}/v_{\parallel}') \tag{2.25}$$

В этом случае $\delta(v_{\parallel}', \beta)$ может оказаться меньше, чем f . Этот универсальный эффект сужения ядра существенен лишь для немалых β , т.к. при $\beta \ll 1$ условие $v_{\parallel}'/\bar{u} = \beta\, v_{\parallel}'/\bar{v}\sqrt{1+\beta^2} >> 1$ выполняется в практически неинтересной области очень больших $v_{\parallel}'/\bar{v}$.

Обычной характеристикой дифференциального сечения является его ширина $f_ц$ в $ц$ -системе. Согласно закону сохранения импульса $m(\vec{v}'-\vec{v})=\mu(\vec{u}'-\vec{u})$. Поэтому ширина $f_ц$ в $m/\mu=(m+m_a)/m_a$ раз больше, чем f. Следовательно, и ядро $A(v_\parallel', \xi_\parallel)$ может быть значительно уже, чем $\sigma(u, |\vec{u}'-\vec{u}|)$, если $m/m_a \gg 1$:

$$\delta_1 \sim f = \frac{m_a}{m+m_a} f_ц . \qquad (2.26)$$

3. Борновское приближение

В борновском приближении (см., например, /10/) дифференциальное сечение зависит только от $|\vec{u}'-\vec{u}|$ и (2.4) принимает вид:

$$A(\vec{v}', \vec{v}) = N_a \bar{v}_a 4\pi\sigma_0 F\left(\frac{\xi}{f}\right) \frac{1}{(\sqrt{\pi}\alpha\bar{v})^3} \frac{1}{\xi} \exp\left\{-\left(\frac{\xi}{\alpha\bar{v}} - \frac{\vec{\xi}\vec{v}'}{\bar{v}_a \xi}\right)^2\right\}. \qquad (3.1)$$

Согласно (3.1), ядро $A(\vec{v}', \vec{v})$ содержит три разнородных множителя: "кинетический множитель" $4\pi\sigma_0 N_a \bar{v}_a$ (частота столкновений для сечения $4\pi\sigma_0$); "квантово-механический множитель" $F(\xi/f)$, возникающий из решения задачи о столкновении двух частиц; остальные множители возникают в результате усреднения по скоростям возмущающих частиц, и их естественно назвать "статистическими".

Борновское приближение является частным случаем модели (2.18) (при $S=0$), и характеристики (2.22) селективного одномерного ядра принимают особо простой вид, а именно:

$$I_1(v_\parallel', \beta) = 1; \quad I_2(v_\parallel', \beta) = \sqrt{\pi}\frac{\sqrt{1+\beta^2}}{\beta^3} \int_{v_\parallel'/\bar{v}}^{\infty} \Phi(\beta y) e^{-y^2 - v_\parallel'^2/\bar{v}^2} dy; \qquad (3.2)$$

$$I_2(0, \beta) = \frac{\sqrt{1+\beta^2}}{\beta^3} \operatorname{arctg}\beta; \quad I_2(v_\parallel', 0) = 1;$$

$$I_2(v_{\parallel}',1)=\frac{\pi}{2\sqrt{2}}\left[1-\Phi^2(|v_{\parallel}'|/\bar v)\right]\exp(v_{\parallel}'^2/\bar v^2);$$

$$I_2(v_{\parallel}',\beta)\Big|_{\beta\to\infty}=\frac{\pi}{2}\left[1-\Phi\left(\frac{|v_{\parallel}'|}{\bar v}\right)\right]\exp(v_{\parallel}'^2/\bar v^2)$$

Согласно (3.2) и (2.22), одномерное ядро в точке $\xi_{\parallel}=0$ не зависит от $v_{\parallel}'$; частота $\nu(v_{\parallel}')$ уменьшается с ростом $|v_{\parallel}'|$, причем, эта зависимость тем сильнее (в шкале $|v_{\parallel}'|/\bar v$), чем больше β (см. кривые 5-7 рис.2). Однако в практически интересной области $v_{\parallel}'\lesssim\bar v$ частота уменьшается не более, чем в два раза.

Рассмотрим более подробно гауссово сечение

$$F(\xi/f)=\exp(-\xi^2/f^2);\quad f=\sqrt{2}\,\hbar/ma, \tag{3.3}$$

соответствующее гауссовому потенциалу взаимодействия /10/

$$U(r)=U_0\exp(-r^2/a^2). \tag{3.4}$$

В этом случае находим

$$A(\vec v',\vec v)=N_a\bar v_a 4\pi\sigma_0\frac{1}{\xi(\sqrt{\pi}\alpha\bar v)^3}\exp\left\{-\left[\xi^2/f^2+(\xi/\alpha\bar v-\vec\xi\vec v'/\xi\bar v_a)^2\right]\right\};$$

$$A(v_{\parallel}',\xi_{\parallel})=\frac{A_0}{2}\left\{\left[1-\Phi\left(\frac{\sqrt{1+b^2}-\beta^2}{2\beta}|x|+\beta\frac{v_{\parallel}'}{\bar v}\frac{x}{|x|}\right)\right]\cdot\right. \tag{3.5}$$

$$\cdot e^{-\left[\frac{\sqrt{1+b^2}+1}{2}x-\frac{v_{\parallel}'}{\bar v}\right]^2}+\left[1-\Phi\left(\frac{\sqrt{1+b^2}+\beta^2}{2\beta}|x|-\beta\frac{v_{\parallel}'}{\bar v}\frac{x}{|x|}\right)\right]\cdot$$

$$\left.\cdot e^{-\left[\frac{\sqrt{1+b^2}+1}{2}x+\frac{v_{\parallel}'}{\bar v}\right]^2}\right\}e^{(v_{\parallel}'/\bar v)^2};\quad A_0=\frac{2\pi\sigma_0 N_a m}{\mu\sqrt{1+b^2}};$$

$$b^2=2\left(\frac{\mu\bar u a}{\hbar}\right)^2=\left(\frac{2\mu\bar u}{mf}\right)^2;\quad x=c\frac{v_{\parallel}'-v_{\parallel}}{\bar v}=\frac{m\bar v^2}{\mu\bar u^2}\frac{v_{\parallel}'-v_{\parallel}}{\bar v};$$

$$\langle\nu\rangle=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\bar u\frac{4\pi}{1+b^2}\sigma_0 N_a;\quad \delta(v_{\parallel},\beta)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{\nu(v_{\parallel}')}{\nu(0)}\frac{\operatorname{arctg}\beta}{\sqrt{1+b^2}}\frac{\mu\bar u^2}{m\bar v^2}\bar v.$$

Отметим, прежде всего, что при выполнении условия

$$(\operatorname{arctg}\beta)/\sqrt{1+b^2} \ll 1 \tag{3.7}$$

эффективная ширина $\delta(v'_{\parallel},\beta)$ мала в сравнении с единицей измерения $(\mu\bar{u}^2\bar{v}/m\bar{v}^2)$ для X. Физический смысл критерия (3.7) очень прост: и малая масса возмущающей частицы ($\beta \ll 1$), и селективность "квантово-механического множителя" ($b^2 \gg 1$) обеспечивают селективность одномерного ядра. В случае $b^2 \gg 1$ имеем:

$$\delta(v'_{\parallel},\beta) = \frac{\nu(v'_{\parallel})}{\nu(0)} \frac{\sqrt{1+\beta^2}}{\sqrt{\pi}\,\beta} f \operatorname{arctg}\beta =$$

$$= \frac{\nu(v'_{\parallel})}{\nu(0)} \sqrt{\frac{1+\beta^2}{\pi \ln 2}} \frac{1}{\beta} f_{1/2} \operatorname{arctg}\beta, \tag{3.8}$$

где $f_{1/2} = \sqrt{\ln 2}\, f$ -есть полуширина сечения на полувысоте. Комбинация $(\pi \ln 2)^{-1/2}\sqrt{1+\beta^{-2}}\operatorname{arctg}\beta$ изменяются от 0,678 до 1,065 при $0<\beta<\infty$, и формула (3.8) хорошо иллюстрирует общее соотношение (2.26).

Формула (3.6) содержит простые предельные случаи

$$A(v'_{\parallel},\xi_{\parallel}) = A_0\left[1-\Phi\left(|x|\sqrt{1+b^2}/2\beta\right)\right], \quad \beta \ll 1;$$

$$A(v'_{\parallel},\xi_{\parallel}) = A_0\left[1-\Phi(b|x|/2)\right] e^{-\left(\frac{bx}{2}\right)^2}, \quad \beta = 1,\ b \gg 1; \tag{3.9}$$

$$A(v'_{\parallel},\xi_{\parallel}) = A_0 e^{-\left(\frac{bx}{2}\right)^2} = A_0 e^{-(\xi_{\parallel}/f)^2}, \quad \beta \gg 1,\ b \gg 1.$$

Графики этих функций приведены на рис.3; ядра для других значений β (но $b \gg 1$) укладываются, очевидно, между кривыми 1 и 3. Для иллюстрации вариаций формы ядра, кривая для случая $\beta \to \infty$ приведена к той же ширине, что и кривая 1 (показана пунктиром). Полуширины ядер (3.9) равны соответственно

$$\delta_{1/2} = 0{,}477\frac{2\beta}{\sqrt{1+b^2}}\,\bar{v}\mu\bar{u}^2/m\bar{v}^2 = 0{,}845\,\delta(0,0), \quad \beta \ll 1;$$

$$\delta_{1/2} = 0{,}882\,\delta(0,1), \qquad \beta = 1,\ b \gg 1; \tag{3.10}$$

$$\delta_{1/2} = \sqrt{\ln 2}\,\frac{2\bar{v}}{b}\mu\bar{u}^2/m\bar{v}^2 = 0{,}940\,\delta(0,\infty) = f_{1/2}, \quad \beta \gg 1,\ b \gg 1.$$

Таким образом, эффективные ширины близки к полуширинам при любых β, лишь бы выполнялось условие селективности (3.7). Численные расчеты по формулам (3.6) показали, что при фиксированном значении $(1+\beta^2)^{-1/2}\,\mathrm{arctg}\,\beta \leq 0{,}1$, ядра, отличающиеся по β (или b), изменяются не более, чем на 5 : 10%. Оказалось также, что форма ядра мало "чувствует" изменение $v_{\parallel}'$ вплоть до $v_{\parallel}' \leq \bar{v}/2$, а в пределах $|v_{\parallel}'| \leq \delta$ симметрична с точностью до 1%. Поэтому практическим критерием селективности ядра может служить условие

$$\delta(v_{\parallel}', \beta) \leq 0{,}1\,\bar{v} \tag{3.11}$$

4. Модель непроницаемых сфер

В этой модели $\sigma(u, m\xi/\mu)$ дается формулой

$$\sigma(u, m\xi/\mu) = \frac{a^2}{4}\left\{1 + \left(\frac{\mu u}{mf}\right)^2\left[\frac{2J_1(\xi/f)}{\xi/f}\right]^2\right\}; \quad f = \hbar/ma, \tag{4.1}$$

справедливой при $\mu a u/\hbar \equiv a/\lambda\!\!\!^{-} \gg 1$ (a -радиус сферы, $J_1(z)$- функция Бесселя первого порядка). Сечение (4.1) содержит изотропную часть (единица в фигурных скобках) и резко селективную часть с полушириной на полувысоте, равной 1,616 f. Сечения изотропного и селективного рассеяния равны каждое πa^2, так что полная частота столкновений определяется сечением $2\pi a^2$. Подстановка (4.1) в (2.4) и (2.14) дает

$$A(\vec{v}';\vec{v}) = \pi a^2 N_a \bar{v}_a \frac{1}{\pi^{3/2}(\alpha\bar{v})^2 \xi} \exp\left[-\left(\frac{\xi}{\alpha\bar{v}} - \frac{\vec{\xi}\vec{v}'}{\xi \bar{v}_a}\right)^2\right] \cdot \tag{4.2}$$

$$\cdot \left\{1 + \left(\frac{\alpha\bar{v}}{f}\right)^2 \left[1 + \frac{\xi^2}{(\alpha\bar{v})^2} + \beta^2 \frac{\xi^2}{\bar{v}^2}\right] \left[\frac{2 J_1(\xi/f)}{\xi/f}\right]^2\right\}.$$

$$\nu(\vec{v}') = N_a \bar{v}_a 2\pi a^2 \left\{\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-z^2} + \left(z + \frac{1}{2z}\right)\Phi(z)\right\};\ z = \frac{v'}{\bar{v}_a}. \tag{4.3}$$

Изотропная часть в (4.1) представляет интерес в том отношении, что позволяет проследить роль только статистических эффектов. Наиболее наглядно они проявляются на одномерном ядре (формально оно получается из (3.6) при $b \to 0, \sigma_0 = a^2/4$):

$$A(v_\parallel', \xi_\parallel) = \frac{1}{2} A_0 \left\{1 - \Phi\left(\frac{1+\beta^2}{2\beta}|x| - \beta \frac{v_\parallel'}{\bar{v}} \frac{x}{|x|}\right) + \right.$$

$$\left. + \left[1 - \Phi\left(\frac{1-\beta^2}{2\beta}|x| + \beta \frac{v_\parallel'}{\bar{v}} \frac{x}{|x|}\right)\right] \exp\left[-x(x - 2v_\parallel'/\bar{v})\right]\right\};$$

$$A_0 = \pi a^2 m N_a / 2\mu;\ \beta = \bar{v}/\bar{v}_a;\ x = m\bar{v}^2 (v_\parallel' - v_\parallel)/\mu \bar{u}^2 \bar{v}. \tag{4.4}$$

$$\nu(v_\parallel') = \pi a^2 N_a \bar{v} \left\{\frac{v_\parallel'}{\bar{v}_a} \Phi\left(\frac{v_\parallel'}{\bar{v}_a}\right) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} I_2(v_\parallel', \beta)\, e^{-(v_\parallel'/\bar{v}_a)^2}\right\}, \tag{4.5}$$

причем функция $I_2(v_\parallel', \beta)$ в (4.5) определена формулой (3.2). В предельном случае $\beta \ll 1$

$$A(v_\parallel', \xi_\parallel) \cong \frac{1}{2} A_0 \left[1 - \Phi(|x|/2\beta)\right] \left\{1 + \exp\left[-x(x - 2v_\parallel'/\bar{v})\right]\right\}. \tag{4.6}$$

Ядро сконцентрировано вблизи точки $v_{\parallel} = v_{\parallel}'$ и имеет малую ширину $0{,}477 \cdot 2\beta$ (в шкале x). Как и в разделе 3, асимметрия ядра (4,6) малая.

При атом-атомных столкновениях обычно $T = T_a$, $\beta = \sqrt{m_a/m}$, и малая величина β – случай сравнительно редкий, т.к. для выполнения критерия (3,11) практической селективности необходимо $\beta \leq 0{,}1$, т.е. $m/m_a \lesssim 10^{-2}$. В случае же столкновений с электронами $\beta = \bar{v}/\bar{v}_a \sim 10^{-3}$, однако, как правило, $T_a \sim 10^2 T$, и ширина ядра в шкале $v_{\parallel}$ оказывается равной $0{,}477 \cdot 2\beta \mu \bar{u}^2/m\bar{v}^2 \simeq$ $\sim \beta T_a \bar{v}/T \sim 0{,}1\bar{v}$

Если $\beta \gtrsim 1$, то ядро (4.4) имеет большую ширину (порядка $\bar{v}$). Например, при $v_{\parallel}' = 0$ имеем:

$$A(0, v_{\parallel}) = \tfrac{1}{2} A_0 \left\{ 1 - \Phi(|v_{\parallel}|/\bar{v}) + \exp(-v_{\parallel}^2/\bar{v}^2) \right\}, \quad \beta = 1; \tag{4.7}$$

$$A(0, v_{\parallel}) = A_0 \exp\left[-(v_{\parallel}/\bar{v})^2\right], \qquad \beta \gg 1.$$

Таким образом, для $\beta \gtrsim 1$ изотропная часть сечения (4.1) приводит к широкому ядру интеграла столкновений.

Переходя к селективной части рассеяния, рассмотрим предельные случаи $\beta \ll 1$ и $\beta \gg 1$. С помощью (2.20), (2,21) находим:

$$A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel}) = A_0 \left\{ 1 - \frac{\pi}{2}\left[t\left[J_0^2(t) + J_1^2(t)\right] - J_0(t)J_1(t) - J_1^2(t)/2t \right] \right\}, \quad (\beta \ll 1),$$

$$A(v_{\parallel}', \xi_{\parallel}) = \tfrac{1}{2} A_0 \tfrac{3\pi}{8} H_1(2t)/t^2, \qquad (\beta \gg 1,\ v_{\parallel}' \ll \bar{v}); \tag{4.8}$$

$$t = |\xi_{\parallel}|/f = |v_{\parallel}' - v_{\parallel}|/f, \quad A_0 = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} a^2 N_a \bar{u}/f; \quad f = \hbar/ma,$$

где $H_1(2t)$ – функция Струве первого порядка. Графики функций (4.8) даны на рис.3; полуширины их равны соответственно $0{,}910 f$ и $1{,}573 f$. Здесь ясно видны те же закономерности, что и в Борновском приближении, – увеличение β уменьшает остроту "излома" ядра в точке $\xi_{\shortparallel}$ =0 и увеличивает его полуширину, приближая ее к полуширине сечения /1,616 f/. Последнее утверждение хорошо прослеживается на эффективной ширине ядра:

$$\delta(v_{\shortparallel}',\beta) = f\,\frac{\nu(v_{\shortparallel}')}{\nu(0)}\,\frac{3\pi}{16}\left[1+\frac{1+\beta^2}{\beta}\,\mathrm{arctg}\,\beta\right]\frac{\sqrt{1+\beta^2}}{1+\beta^2/2+\beta^2(v_{\shortparallel}'/\bar{v})^2}\,. \tag{4.9}$$

При $v_{\shortparallel}'$ =0 имеем монотонное увеличение $\delta(0,\beta)$ с ростом β в пределах 1,178 f ÷ 1,851 f, что очень близко к соответствующим полуширинам ядер.

5. Модель Ленарда-Джонса

Во многих случаях в потенциале взаимодействия можно выделить две характерные области расстояний: "внутренняя область", хорошо описываемая моделью непроницаемых сфер, и "внешняя область", в которой потенциальная энергия значительно меньше кинетической. Если предположить также малость длины волны де-Бройля, то для расчета рассеяния можно применить метод эйконала (см., например, /10-12/). Несложные вычисления приводят к следующему выражению для амплитуды рассеяния:

$$f(\theta) = ika_1^2\left\{e^{i\psi}/2ka_1 + J_1(qa_1)/qa_1 + \int_{a_1}^{\infty} J_0(q\rho)\left[1-e^{i\varphi(\rho)}\right]\frac{\rho\,d\rho}{a_1^2}\right\};$$

$$\varphi(\rho) = -\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2+z^2})\,dz/\hbar u\,;\quad q = 2k\sin\frac{\theta}{2}\,;\quad k = \lambda^{-1} = \mu u/\hbar \tag{5.1}$$

Параметр a_1 есть радиус непроницаемой сферы; член $J_1(qa_1)/qa_1$ дает дифракционное рассеяние на этой сфере, а член $\exp(i\psi)/2ka_1$ (ψ -несущественная для нас фаза) есть изотропное рассеяние, подсчитанное в классическом приближении /ср.с (4.1)/.

Формула (5.1) будет конкретизироваться для потенциала

$$U(r) = 4U_0\left[(a/r)^{12} - (a/r)^6\right]. \tag{5.2}$$

Здесь U_0 есть глубина потенциальной ямы, a -радиус, при котором $U=0$. Для (5.2) имеем:

$$\varphi(\rho) = \left[(a/\rho)^5 - \frac{21}{32}(a/\rho)^{11}\right]\psi; \tag{5.3}$$

$$\psi = \frac{3\pi}{2}\frac{U_0 a}{\hbar u} = \frac{3\pi}{4}\frac{U_0}{\mu u^2/2} ka.$$

Рассмотрим некоторые особенности этой функции. Множитель ψ определяется произведением малого ($2U_0/\mu u^2$) и большого ($ka = a/\lambda\!\!\!^{-}$) параметров, и во многих случаях $\psi \gg 1$ (см.таблицу 1[3]). Максимальное значение $\varphi(\rho) = 0{,}402\,\psi$ достигается при $\rho/a = 1{,}063$. "Классический" же угол отклонения

$$2\sin\frac{\theta_c}{2} \cong \theta_c = \frac{1}{k}\frac{d\varphi(\rho)}{d\rho} = -\frac{\psi}{ka}\left[5(a/\rho)^6 - \frac{231}{32}(a/\rho)^{12}\right] \tag{5.4}$$

имеет экстремальное значение

$$\theta_c = -\frac{50\pi}{77}\frac{2U_0}{\mu u^2} = -2{,}038\frac{2U_0}{\mu u^2} = -\frac{200}{231}\frac{\psi}{ka} \tag{5.5}$$

при $\rho/a = 1{,}193$. Таким образом, если $ak \gg 1$ и $2U_0/\mu u^2 \ll 1$, то вся "внешняя часть" потенциальной кривой дает рассеяние на малые углы. Заметим теперь, что при $\rho = a$ имеем $\theta_c = 71\psi/32ka$, последующее уменьшение ρ приводит к резкому увеличению θ_c. Следовательно, параметр a в (5.2) можно отождествить с радиусом a_1 непроницаемости в (5.1).

Для многих практически интересных объектов $\psi \gg 1$ (см.таблицу 1). Поэтому особый интерес представляет асимптотическое поведение $f(\theta)$ при $\psi \to \infty$. Для вычисления $f(\theta)$ и полного сечения рассеяния в этом случае достаточно в $\varphi(\rho)$ учитывать только член $(a/\rho)^5$. С помощью простых выкладок находим:

---

3) Числовые значения параметров взяты из данных по вязкости, согласно /13/. В случае Ne речь идет об основном состоянии.

$$f(0) = i k \rho_B^2 \, e^{i\pi/5} \, \Gamma(3/5)/2 = i \, e^{i\pi/5} \, 0{,}7446 \, k \rho_B^2 ; \tag{5.6}$$

$$\rho_B = a \varphi^{1/5} ;$$

$$\sigma(u) = \frac{4\pi}{k} \, \mathrm{Im} \, f(0) = \pi \rho_B^2 \, \mathrm{Cos} \frac{\pi}{5} \cdot \Gamma(3/5) = 2{,}41 \, \pi \rho_B^2 .$$

Параметр $\rho_B = a\varphi^{1/5}$ есть, очевидно, значение прицельного расстояния, для которого $\varphi(\rho_B) \sim 1$, т.е. практически совпадает с так называемым радиусом Вайскопфа. И $\sigma(u)$ и $|f(0)|$ определяются, как и следовало ожидать, величиной ρ_B. Эффективная ширина дифференциального сечения, определяемая как

$$\Delta\theta \equiv \left[\frac{\sigma}{4|f(0)|^2} \right]^{1/2} = \frac{\bar{\lambda}}{\rho_B} \left[\frac{2\pi \, \mathrm{Cos}(\pi/5)}{\Gamma(3/5)} \right]^{1/2} = \tag{5.7}$$

$$= 1{,}857 \, (k\rho_B)^{-1} = 1{,}857 \, \frac{\bar{\lambda}}{\rho_B}$$

также зависит от ρ_B и в наших условиях очень мала. Для приложений весьма важен тот факт, что полное сечение может быть значительно больше, чем сечение πa^2 изотропного рассеяния (в 2,41 $\varphi^{4/5}$ раз). Это означает, что большая часть сечения связана с резко направленным селективным рассеянием (и классическим, и квантовым), и только малая часть – с изотропным рассеянием.

Интеграл в (5.1) был рассчитан [4] на ЭВМ, и некоторые из результатов даны на рис.4, где по оси ординат отложено отношение $|f(\theta)|^2/|f(0)|^2$ как функция "дифракционной переменной" $z = 2k\rho_B \, \mathrm{Sin}(\theta/2)$. В этих переменных дифференциальное сечение оказывается мало чувствительным к величине φ при $\varphi \geq 5$ в области малых z, где расположен главный дифракционный максимум ($z < \pi$). Полуширина (на полувысоте) этого максимума равна, примерно, 1,20 (или $1{,}20/k\rho_B$ в угловых переменных) и с изменением φ колеблется не более, чем на 5% (кривая 1 рис.4а). Эта величина примерно в 1,5 раза меньше, чем эффективная шири-

4) Вычисления на ЭВМ выполнены С.П.Петровой, и авторы приносят ей свою благодарность.

на $\Delta\vartheta$ (5.7), в отличие от случая непроницаемой сферы, где полуширина 1,616/ka и $\Delta\vartheta$ =1,77/ka очень близки. Крылья функции $|f(\vartheta)|^2$, представленные на рис.4 в увеличенном масштабе (X50), испытывают заметные осцилляции, положение и амплитуда которых существенно зависит от φ. На рис.4а даны, как функции φ, значения $|f(0)|^2/(k\rho_B)^2$. Эти характеристики осциллируют сильнее,чем полуширина, но также немного (10 : 15%). Для удобства сравнения на рис.4 нанесены графики функции $[2J_1(0{,}743z)/0{,}743z]^2$,которая описывает дифференциальное сечение при рассеянии на непроницаемой сфере радиуса $\rho_B\cdot 10{,}743$ и которая имеет примерно ту же полуширину (1,20 в единицах z), что и остальные кривые. Основное отличие этих кривых содержится в "крыльях": рассеяние на потенциале Ленарда-Джонса приводит к существенно более интенсивным "крыльям", чем в случае непроницаемой сферы. Это обстоятельство связано, очевидно, с "классическим" рассеянием в потенциале (5.2). Пунктирная гипербола на рис.4 дает "классическое" дифференциальное сечение для потенциала $\sim z^{-6}$, описываемое в наших обозначениях формулой

$$|f_{\text{кл.}}(\vartheta)|^2/|f(0)|^2=\frac{2}{3}5^{1/3}z^{-7/3}/[\Gamma(3/5)]^2=0{,}514z^{-7/3};$$

$$z=2ka\varphi^{1/5}\sin\frac{\vartheta}{2}. \qquad (5.8),$$

Осцилляции графика $|f(\vartheta)|^2$ происходят примерно около кривой (5.8), что подтверждает приведенные соображения о причине появления "крыльев".

Из проведенного анализа дифференциального сечения следует, что с точностью до осцилляций оно имеет вид

$$\sigma(u,m\xi/\mu)=\sigma_0 F(\xi\bar{u}^t/f u^t)\left(\frac{u}{\bar{u}}\right)^s;\quad f=1{,}20\hbar/m\bar{\rho}_B,$$

$$\bar{\rho}_B=a\left[\frac{3\pi}{2}\,\frac{U_0 a}{\hbar\bar{u}}\right]^2;\quad \sigma_0=(k\bar{\rho}_B^2)^2\left[\Gamma(3/5)/2\right]^2; \qquad (5.9)$$

$$t=1/5,\quad s=6/5$$

Легко показать, что такое изменение модели (в сравнении с (2.18) оставляет в силе формулы (2.19) - (2.25), если заменить $s\to t+s$

в $A(v_\parallel', \xi_\parallel)$, $I_1(v_\parallel', \beta)$ и $s \to s+2t$ в $I_2(v_\parallel', \beta)$. Кроме того, в (2.20), (2.21) следовало бы заменить $\xi_\parallel$ на $\xi_\parallel(\bar{u}/u_{эф})^t$, где $u_{эф} \sim \sqrt{\bar{u}^2 + v_\parallel'^2}$; поскольку, однако, $t = 1/5 \ll 1$, эта замена имеет смысл лишь при $v_\parallel' \gg \bar{u}$.

Одномерные ядра, определяемые по (2.20), (2.21), получены численным интегрированием, и результаты представлены на рис.4. Как и сечение, ядро имеет резкую дифракционную часть и заметные "классические" крылья, спадающие по закону $\xi_\parallel^{-4/3}$. Полуширина центральной части равна $0{,}78 f$ (для $\beta \ll 1$) и $1{,}30 f$ (для $\beta \gg 1$, $v_\parallel' = 0$). Крылья приводят к тому, что эффективная ширина оказывается заметно больше полуширины ядра. Именно, с помощью (2.22), (2.24) нетрудно показать, что с ростом β эффективная ширина изменяется в пределах

$$1{,}59 f \le \delta(0,\beta) < 2{,}38 f \tag{5.10}$$

Для анализа роли крыльев можно предложить, например, следующую аппроксимацию селективной части одномерного ядра:

$$A(z) = A_0 \left\{ a_1 e^{-|z|/\sigma_1} + a_2 \left[1 + \frac{2^{3/4}-1}{\sigma_2} |z| \right]^{-4/3} \right\}; \tag{5.11}$$

$$a_1 + a_2 = 1, \quad z = \frac{\xi_\parallel}{f} \varphi^{1/5},$$

где первый член описывает дифракцию (квантово-механическое рассеяние), а второй член ответственен за "классическое" рассеяние и наиболее существенен в крыльях. Коэффициенты a_1, a_2 и характеристики ширин σ_1, σ_2 находятся из условия нормировки на максимум ($a_1 + a_2 = 1$), совпадения полуширины и эффективной ширины аппроксимации (5.11) и истинного ядра, а также при учете асимптотики ядра с помощью (5.8), (2.20), (2.21). Числовые оценки дают:

$$\beta = 0: \quad a_1 \cong 0{,}937; \quad a_2 \cong 0{,}063; \quad \sigma_1 \cong 1{,}08; \quad \sigma_2 \cong 2{,}0;$$
$$\beta \to \infty: \quad a_1 \cong 0{,}937; \quad a_2 = 0{,}063; \quad \sigma_1 = 1{,}84; \quad \sigma_2 = 3{,}0. \tag{5.12}$$

Из (5.12) следует, что полуширины обоих членов в (5.11) одного порядка, а амплитуда второго значительно меньше ($a_2 \ll a_1$). Это, однако, не означает, что "классическим" рассеянием можно пренебречь. Определяющим здесь является соотношение полных сечений процессов, или частот столкновений, которые пропорциональны площадям ядер. Нетрудно убедиться, что интегралы по z от обоих членов в (5.11) одного порядка (β =0 : ν_1/ν_2 =1,62; $\beta \to \infty$: ν_1/ν_2 =2,05).

Таким образом, в некоторых случаях "классическое" рассеяние может играть заметную роль, и характерное для него медленное спадание крыльев одномерного ядра может своеобразно проявиться на особенностях диффузии в пространстве скоростей.

6. З а к л ю ч е н и е

Подведем итоги анализа ядра при селективном рассеянии. Основной вывод состоит в том, что ядро в этом случае есть симметричная функция от $v_\parallel' - v_\parallel$: это обстоятельство существенно упрощает решение уравнений (1.2) и анализ поведения атома во внешнем электромагнитном поле.

Основные свойства селективного ядра определяются, главным образом, видом дифференциального сечения рассеяния, а статистические условия (отношение температур и масс сталкивающихся частиц) играют второстепенную роль. Удобной характеристикой одномерного ядра является его эффективная ширина $\delta(v_\parallel', \beta)$. В таблице 2 сведены значения $\delta(0, \beta)$ для трех моделей, рассматриваемых в разделах 3-5; здесь же даны значения полуширины ядра, эффективной ширины и полуширины дифференциального сечения. Бросаются в глаза следующие обстоятельства: при малых β полуширина ядра почти вдвое меньше полуширины сечения: при больших β ширина ядра приближается к ширине сечения; эффективные ширины почти копируют ширины ядер, если сечение не имеет "крыльев", и почти вдвое превышают ширину ядра в модели Ленарда-Джонса, что обусловлено наличием мощных "крыльев".

Если в качестве независимой переменной выбрать $\xi_\parallel / \delta$, то из таблицы 2 легко заметить, что одномерные ядра в первых двух моделях оказываются очень близкими (см.рис.5), поэтому δ можно считать основной характеристикой ядра, а критерий практической селективности (3.11) приобретает универсальное, не зависящее от модели значение.

Таблица 1. Параметры модели Ленарда-Джонса

Сталкив. частицы	$a(\mathring{A})$	$\frac{U_0}{K_б}(^{\circ}K)$	$T(^{\circ}K)$	$\frac{U_0}{K_б T}$	φ	Ka	$2{,}41\varphi^{2/5}$	$1{,}85(K\rho_\beta)^{-1}$
$Ne-Ne$	2,79	35,7	380	0,094	8,0	36	5,5	$3{,}4.10^{-2}$
CO_2-CO_2	4,0	190	1000	0,190	54	120	11,9	$0{,}62.10^{-2}$
CO_2-N_2	3,89	132	1000	0,132	32	104	9,7	$0{,}89.10^{-2}$

Таблица 2. Ширины сечений и ядер

Модель:	Гауссово сечение			Непроницаемой сферы			Ленарда-Джонса		
Полуширина дифференц. сечения $f_{1/2}$	$\sqrt{2\ln 2}\ \hbar/ma$			$1{,}616\ \hbar/ma$			$1{,}20\ \hbar/m\rho_\beta$		
Эффективная ширина сечения	$0{,}753\ \frac{m}{\mu}\frac{f_{1/2}}{\bar{u}}$			$1{,}097\ \frac{m}{\mu}\frac{f_{1/2}}{\bar{u}}$			$1{,}539\ \frac{m}{\mu}\frac{f_{1/2}}{\bar{u}}$		
β	0	1	∞	0	1	∞	0	1	∞
Полуширина ядра $\delta_{1/2}/f_{1/2}$	0,573	0,659	1	0,563		0,973	0,650		1,083
Эффективная ширина ядра $\delta/f_{1/2}$	0,678	0,752	1,065	7,729	0,884	1,145	1,324	1,536	1,98

Л и т е р а т у р а

1. С.Г.Раутиан, И.И.Собельман. УФН, 90, 209, 1966.
2. С.Г.Раутиан. ЖЭТФ, 51, 1176, 1966.
3. И.И.Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Физматгиз, 1963.
4. А.П.Колченко, А.К.Попов, С.Г.Раутиан, С.А.Черкасов. Доклад на Всесоюзном симпозиуме по физике газовых ОКГ. Новосибирск, 30 июня – 4 июля 1969 г.
5. Ю.А.Вдовин, В.М.Галицкий, В.М.Ермаченко. Доклад на Всесоюзном симпозиуме по физике газовых ОКГ. Новосибирск, 30 июня – 4 июля 1969 г.
6. T. Hänsch, P. Toschek. Доклад на Всесоюзном симпозиуме по физике газовых ОКГ. Новосибирск, 30 июня – 4 июля 1969 г.
7. T. Hänsch, P. Toschek. IEEE, QE-5, 61, 1969.
8. P. R. Berman, W. E. Lamb, Jr., Phys. Rev., 2A, 2435, 1970.
9. J. Keilson, J. E. Storer. Quart. Appl. Math., 10, 243, 1952.
10. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз, 1963.
11. Р.Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц, стр.532, изд. "Мир", Москва, 1969.
12. М.Гольдберг, К.Ватсон. Теория столкновений, стр. 297, изд. "Мир", 1967.
13. Дж.Гиршфельдер, Ч.Кертисс, Р.Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. Изд. ИЛ, Москва, 1961.

Подписи к рисункам

Рис.1. Иллюстрация к законам сохранения импульса и энергии при упругих столкновениях.

Рис.2. Зависимость трехмерной и одномерной частоты от скорости. Кривые 1-4 - трехмерная частота $\nu(\vec{v})/\nu(0)$: 1) $n=0$, 2) $n=1$, 3) $n=2$, 4) $n=2/5$. Кривые 5-11 - одномерная частота $\nu(v_{\parallel})/\nu(0)$: 5) $s=0, \beta=0$. 6) $s=0, \beta=1$; 7) $s=0, \beta\to\infty$; 8) $s=2, \beta=1$; 9) $s=2, \beta\to\infty$; 10) $s=2, \beta=0$; 11) $s+2t=8/5$, $\beta\to\infty$; 12) $s+2t=8/5, \beta=0$.

Рис.3. Форма селективного ядра для гауссовой модели и модели непроницаемых сфер. Кривые 1-3 отвечают гауссовой модели: 1) $\beta\ll 1$; 2) $\beta=1, b\gg 1$; 3) $\beta\gg 1, b\gg 1$. Кривые 4-5 -модели непроницаемых сфер: 4) $\beta\ll 1$;5) $b\gg 1$, $\beta\gg 1$.

Рис.4. Графики дифференциального сечения и селективного ядра для потенциала Ленарда-Джонса. Рис.4а иллюстрируем зависимость от φ некоторых характеристик сечения.

Рис.5. Графики одномерных ядер как функции $\xi_{\parallel}/\delta$.

1) $s=0, \beta\ll 1$; 2) $s=0, \beta=1$; 3) $s=0, \beta\gg 1$; 4) $s=2, \beta\ll 1$; 5) $s=2, \beta\to\infty$; 6) $s+2t=8/5, \beta\ll 1$; 7) $s+2t=8/5$, $\beta\gg 1$.

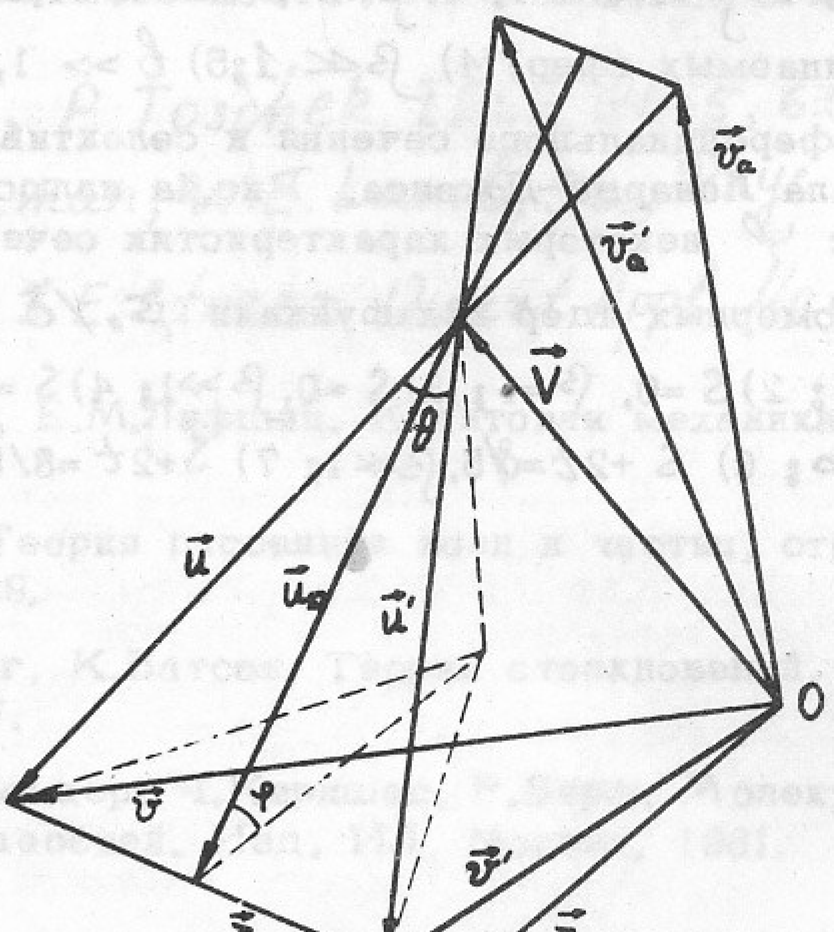
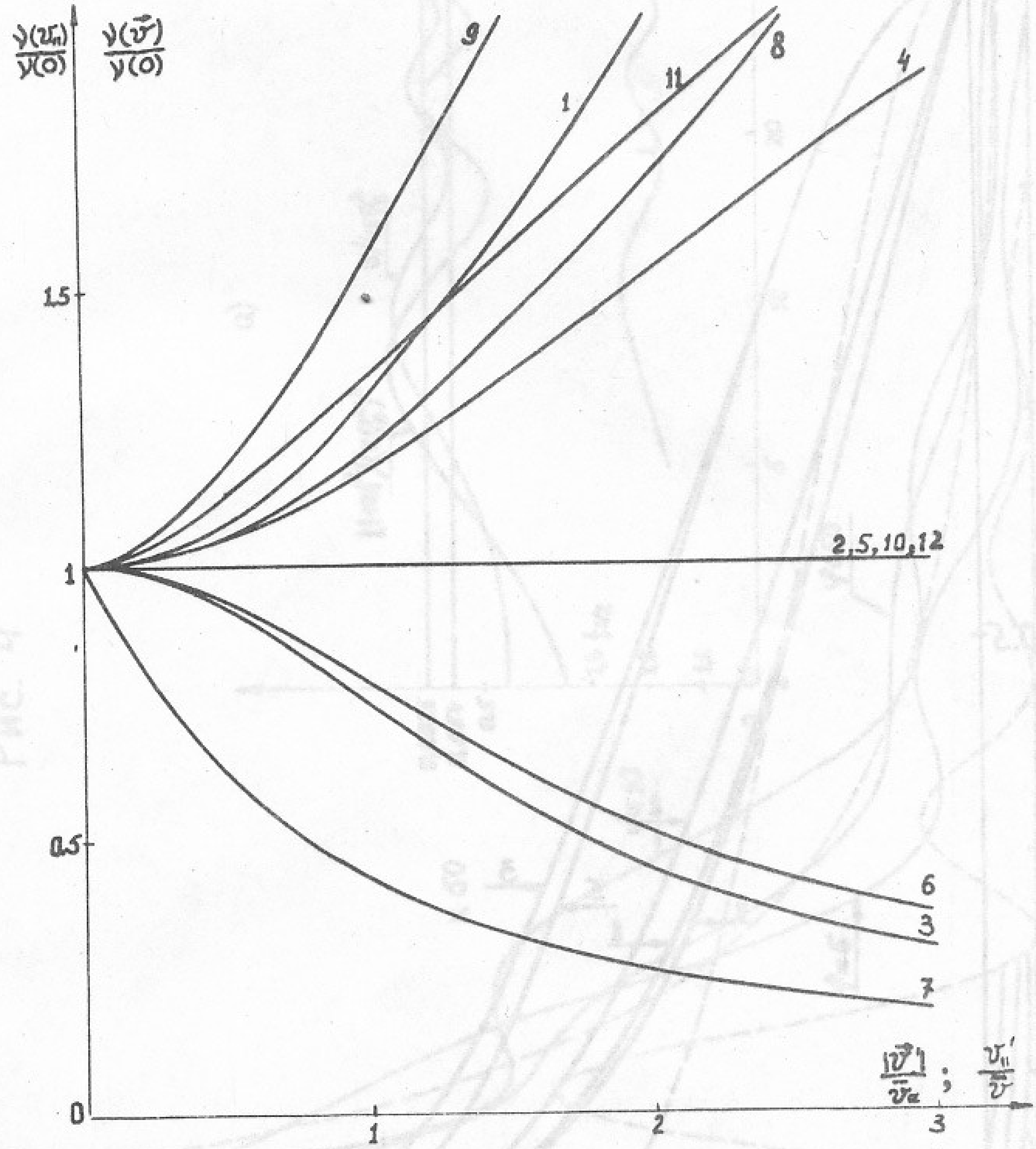


Рис. 1



$\frac{\nu(v_\parallel)}{\nu(0)}$
$\frac{\nu(\vec{v})}{\nu(0)}$
9
1
11
8
4
1,5
1
2,5,10,12
0,5
6
3
7
0
$\frac{|\vec{v}'|}{v_a}$; $\frac{v_\parallel'}{v}$
1
2
3

Рис. 2

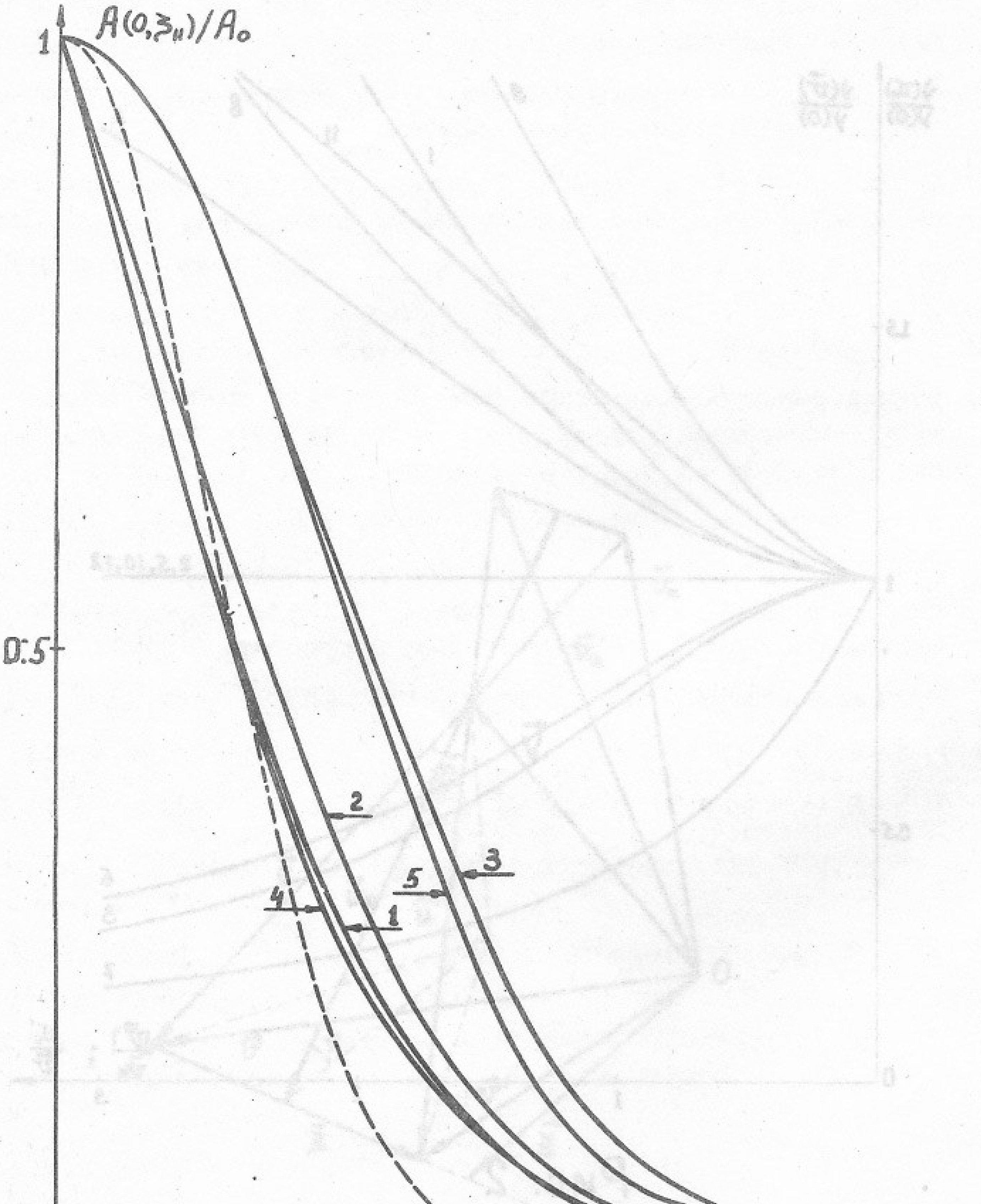
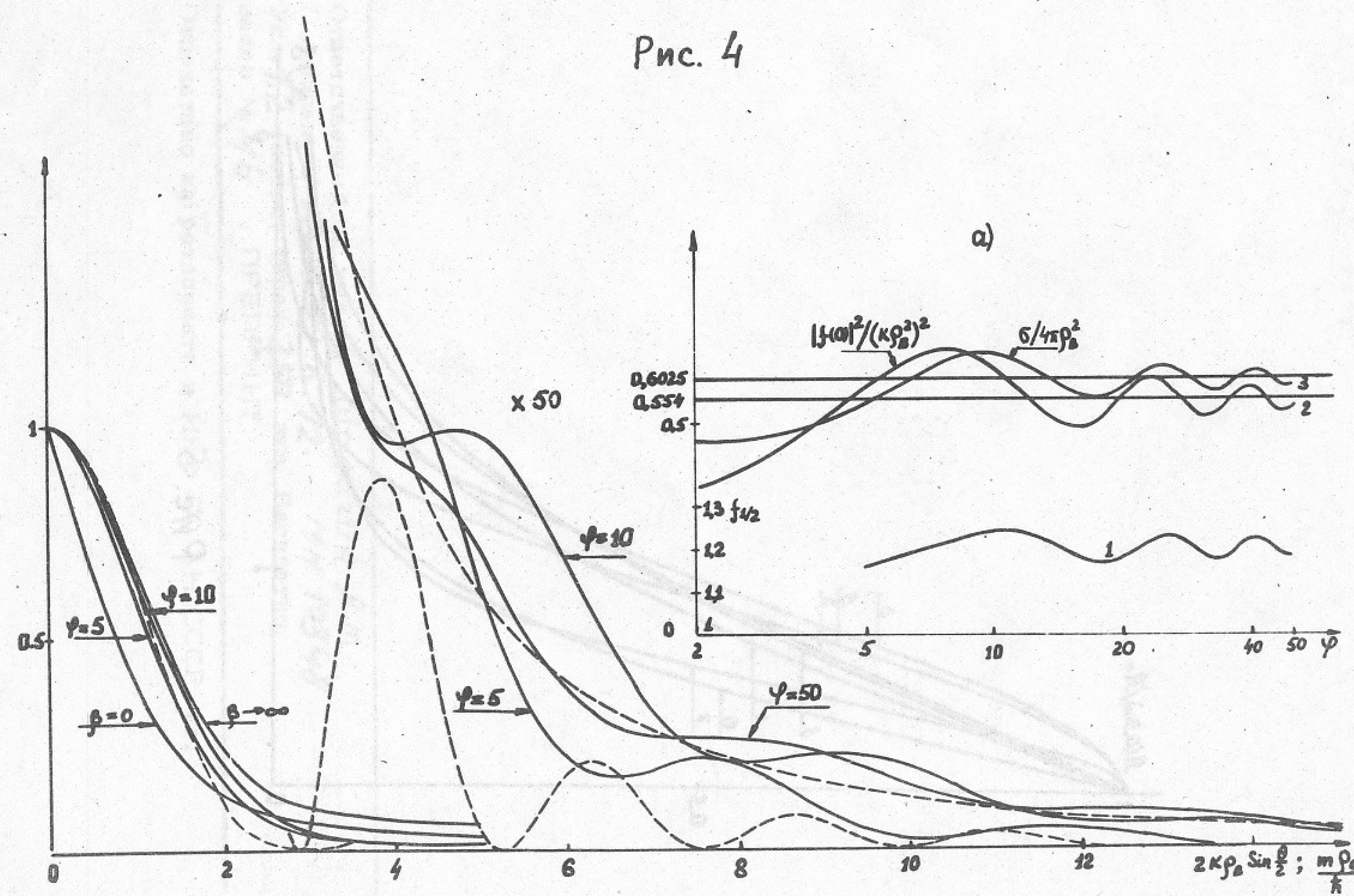


Рис. 3

Рис. 4



x 50
φ=10
φ=5
φ=50
β=0
β→∞
a)
0,6025
0,554
0.5
1,3
$f_{1/2}$
1,2
1,1
1
0
2
5
10
20
40
50
φ
3
2
1
0
2
4
6
8
10
12

Рис. 5

Ответственный за выпуск Шалагин А.М.
Подписано к печати 12.6.72 МН 10348
Усл. 1,2 печ.л., тираж 250 экз. Бесплатно.
Заказ № 46 . ПРЕПРИНТ

Отпечатано на ротапринте в ИЯФ СО АН СССР, вг.