

P4-2001-256

В. К. Игнатович

**ХИМИЧЕСКИЙ СДВИГ НЕЙТРОННЫХ
РЕЗОНАНСОВ И НЕКОТОРЫЕ ИДЕИ,
КАСАЮЩИЕСЯ ТЕОРИИ РЕЗОНАНСОВ
И ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ**

Направлено в журнал «ЭЧАЯ»

*Светлой памяти дорогого человека и
замечательного ученого Юрия Мечи-
славовича Останевича с печалью по-
свящается*

Мне льстило, когда на моем столе внезапно звонил телефон и Юра звал к себе поделиться новой идеей. Ему нравилось делиться со мной потому, что я, как он говорил, умел быстро оценить величину предсказываемого им эффекта. На самом деле все было иначе. Я, конечно, пытался оценить величину, но обычно сильно, иногда на порядки, ошибался в ту или иную сторону. Он озадаченно и разочарованно смотрел на меня, потом начинал готовить кофе и набивать табаком трубку, заводя беседу иногда о посторонних вещах, вдруг находил ошибку в моих рассуждениях и сам получал уже правильную оценку. Мне оставалось лишь удивляться неиссякаемости его идей и точности знаний. Я был только неким катализатором для него, но гордился уже и этим.

Введение

В связи с 65-летней годовщиной со дня рождения Ю.М.Останевича, преждевременно и неожиданно ушедшего от нас, была задумана публикация сборника воспоминаний об этом замечательном ученом. Я получил предложение рассказать о своем сотрудничестве с ним и захотел написать небольшой обзор, в котором бы прослеживалась судьба некоторых его идей. В 1973 году мне привелось работать с Ю.Останевичем над исследованием химических сдвигов [1] при резонансном захвате нейтрона ядром, поэтому я решил в первую очередь сделать обзор на эту тему, а затем коротко рассказать и о других идеях, которые Юре было интересно обсуждать со мной.

К сожалению, получившаяся статья по каким-то параметрам оказалась неподходящей для юбилейного сборника, и потому было решено направить ее в печать отдельно.

Что такое химический сдвиг. Основная тема данной работы относится к резонансному захвату нейтрона ядром, который в идеальном случае бесконечно тяжелого и неподвижного ядра описывается функ-

цией вероятности

$$W(E_n) \propto \frac{1}{(E_n - E_0)^2 + \Gamma^2/4}, \quad (1)$$

где E_n — энергия налетающего нейтрона, E_0 — собственное положение резонанса и Γ — собственная ширина резонансной линии.

В действительности ядро имеет конечную массу, подвижно и находится под воздействием внешних условий. Нас здесь будут интересовать именно внешние условия, из-за влияния которых резонанс наблюдается не при собственном значении энергии E_0 , указанном в (1), а при других значениях $E_0(C)$, где C — характеристика внешних условий, таких как химическое или структурное окружение исследуемого ядра. У двух веществ с различными внешними условиями C_1 и C_2 положение резонанса $E_0(C_{1,2})$ различно. Это различие $E_0(C_1) - E_0(C_2)$ и называется химическим сдвигом. Задача состоит в том, чтобы оценить и измерить его величину и на основе измерений получить информацию о самом ядре или его окружении. Но сначала поясним, почему этот сдвиг вообще происходит.

Каждое ядро имеет внутреннюю E_i и внешнюю E_e энергии. Внутренняя обусловлена взаимодействием и движением нейтронов и протонов, составляющих ядро, а внешняя — взаимодействием ядра с окружающими электронами. В принципе, имеется еще взаимодействие с другими ядрами и внешними полями, но мы ими будем пренебрегать, поскольку гравитационные взаимодействия ничтожны, а внешние электрические в значительной мере экранируются окружающими электронами.

Внешняя энергия E_e зависит от расположения и количества электронов, т.е. от химического окружения и от структуры вещества, а также от свойств самого ядра: размеров, магнитных и электрических моментов. Нас здесь будет интересовать только зависимость от его радиуса R , поэтому внешнюю энергию мы будем представлять как $E_e(C, R)$, указывая зависимость от R и от внешних условий C .

При захвате нейтрона часть энергии передается на возбуждение ядерного резонанса E_0 , т.е. внутренней энергии, величина которой не зависит от внешних обстоятельств, а часть — на изменение внешней энергии. Внешняя энергия не менялась бы, если бы при захвате нейтрона не менялся бы радиус R . Если же при захвате радиус ядра

меняется: $R \rightarrow R + \delta R$, то меняется и E_e :

$$E_e(C, R) \rightarrow E_e(C, R + \delta R) = E_e(C, R) + \delta_R E_e(C, R),$$

где

$$\delta_R E_e(C, R) = \delta R \frac{dE(C, R)}{dR}.$$

Это изменение означает, что для возбуждения резонанса E_0 нейтрон должен иметь энергию на $\delta_R E_e(C, R)$ больше E_0 . Таким образом, если в рассеянии нейтронов на ядрах резонанс виден при энергии E_r , то $E_r \equiv E_0(C) = E_0 + \delta_R E_e(C, R)$ и в двух разных веществах с химическим составом C_1 и C_2 положение E_r различается на величину

$$\Delta \equiv \delta E_r = [E_0 + \delta_R E_e(C_2, R)] - [E_0 + \delta_R E_e(C_1, R)] = \delta_{R,C}^2 E_e(C, R),$$

где

$$\delta_{R,C}^2 E_e(C, R) = \delta R \delta C \frac{\partial^2}{\partial R \partial C} E_e(C, R).$$

Величина $\Delta \equiv \delta_{R,C}^2 E_e(C, R)$ называется химическим сдвигом резонанса. Его можно измерить экспериментально, и если удастся определить изменение химического параметра $\delta C = C_2 - C_1$ и зависимость $E_e(C, R)$ от C и R , то измеренное значение Δ позволяет найти изменение радиуса ядра δR в момент захвата нейтрона. Это представляет интерес для ядерной физики. Правда, количество работ в этом направлении невелико, потому что нейтронные эксперименты при измерении малых величин очень трудоемки.

Большая часть исследований химических сдвигов проводится с помощью мессбауэровской спектроскопии, где химический сдвиг называется изомерным. В работах по нейтронным резонансам [1, 2] он также назывался изомерным и только в [3] стал более корректно называться химическим. Мессбауэровская спектроскопия очень прецизионна, но приложима только к небольшому числу ядер с низколежащими и узкими резонансами. Возможности нейтронной спектроскопии в этом отношении шире, но и трудностей у нее больше.

Задача об измерении химических сдвигов в нейтронных резонансах была поставлена в [1], а результаты измерений и обработки экспериментальных данных приведены в работах [2, 3].

Данная статья состоит из трех частей. В первой части подробно пересказывается суть работы [1], дается обзор экспериментов и при-

водятся их результаты. Здесь же коротко излагается суть другой работы [4], выполненной с Ю.Останевичем, в которой рассматривается возможность измерения разности энергии (изомерных сдвигов) рентгеновских линий атома, у которого ядро находится в основном или возбужденном состоянии.

Вторая часть посвящена теории нейтронных резонансов, которую мы иногда обсуждали с Ю.Останевичем. Помню, нам обоим не нравилось описание резонансов с помощью компаунд-состояний, поскольку ничего кроме феноменологии такой подход не содержит. В те времена мы обсуждали возможность поиска потенциала для описания резонансного рассеяния, но ни к чему конкретному не пришли. В настоящее время имеется соответствующий математический аппарат, и во второй части данной работы предпринимаются первые шаги для возможной реализации этой программы.

В третьей части критически обсуждается существующая теория рассеяния. Показывается ее несоответствие каноническому аппарату квантовой механики, и рассматривается более корректный, с точки зрения автора, вариант. Этот вопрос мы тоже когда-то обсуждали с Ю.Останевичем. Наше неудовольствие состояло в том, что описание рассеяния с помощью сечений приводит к довольно парадоксальным результатам, при которых сечение поглощения, например, может оказаться значительно больше геометрического сечения ядра. Однако в те времена нам не удалось найти какой-нибудь разумной альтернативы. При подготовке же данной статьи возникла идея, которая и изложена в третьей части. Согласно этой идее если нейтрон описывается плоской волной, то рассеяние нужно также описывать плоскими, а не сферическими волнами. В результате возникает не сечение, а вероятность рассеяния.

Для полноты описания моего научного сотрудничества с Ю.Останевичем в список литературы включены и другие работы [5, 6], в которых мне привелось быть его соавтором. История публикации [6] заслуживает отдельного разговора, но она будет изложена в другой статье.

1. Изомерный сдвиг и нейтронные резонансы

Работа [1] не была опубликована в каком-либо широко распространенном периодическом издании и поэтому стала уже библиографической

редкостью. В данной статье представляется возможность изложить ее снова и более подробно.

1.1. Взаимодействие ядра с электронами

Ядро имеет заряд Ze и кулоновски взаимодействует с электронами. Его размеры конечны, и распределение заряда в нем характеризуется плотностью $\rho_N(\mathbf{r})$. Окружающие же электроны описываются распределением $\rho_e(\mathbf{r})$.

1.1.1. Полное кулоновское взаимодействие

Кулоновское взаимодействие электронов и ядра с учетом конечных размеров последнего равно [7]

$$E_e(C, R) = -Ze^2 \int_V d^3r_e \int_{V_N} \frac{\rho_N(\mathbf{r}_N)\rho_e(\mathbf{r}_e)}{|\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_e|} d^3r_N, \quad (2)$$

где интегрирование по \mathbf{r}_N производится по объему ядра V_N , а интегрирование по \mathbf{r}_e — по всему объему V атома и его окрестности.

Представим $1/|\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_e|$ в виде разложения:

$$\frac{1}{\sqrt{r_N^2 + r_e^2 - 2r_N r_e \cos \chi}} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{r_N^n \theta(r_N < r_e)}{r_e^{n+1}} + \frac{r_e^n \theta(r_N > r_e)}{r_N^{n+1}} \right] P_n(\cos \chi), \quad (3)$$

где $P_n(x)$ — полином Лежандра, а $\theta(x > y)$ — ступенчатая функция, равная 1 или 0, когда неравенство в ее аргументе выполнено или нет соответственно.

Подстановка разложения (3) в (2) дает мультипольное разложение энергии взаимодействия. В том случае, когда дипольное, квадрупольное и более высокого порядка мультипольные взаимодействия малы (а мы будем интересоваться именно таким случаем), в сумме выражения (3) можно отбросить все слагаемые за исключением наименьшего с $n = 0$.

1.1.2. Скалярная часть кулоновского взаимодействия

Итак, мы ограничимся только наименьшим по степени n , т.е. скалярным, членом в сумме (3):

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_e|} \approx \left[\theta(r_N < r_e) \frac{1}{r_e} + \theta(r_N > r_e) \frac{1}{r_N} \right]. \quad (4)$$

Эта часть наиболее существенна для определения изменения энергии ядра при изменении его радиуса.

Подстановка (4) в (2) дает $E_e(C, R) \approx$

$$\approx -Ze^2 \left[\int_0^{r_N} r_e^2 dr_e \int_0^{R(\Omega_N)} \frac{r_N^2 dr_N}{r_N} + \int_0^{R(\Omega_N)} r_N^2 dr_N \int_{r_N}^{\infty} \frac{r_e^2 dr_e}{r_e} \right] \rho_N(\mathbf{r}_N) \rho_e(\mathbf{r}_e) d\Omega_N d\Omega_e, \quad (5)$$

где явно указано, что радиус ядра $R(\Omega_N)$ может зависеть от углов Ω_N , если ядро не сферически-симметрично.

Второй член в квадратных скобках (5) может быть преобразован следующим образом:

$$\int_0^{R(\Omega_N)} r_N^2 dr_N \int_{r_N}^{\infty} \frac{r_e^2 dr_e}{r_e} = \int_0^{R(\Omega_N)} r_N^2 dr_N \int_0^{\infty} \frac{r_e^2 dr_e}{r_e} - \int_0^{R(\Omega_N)} r_N^2 dr_N \int_0^{r_N} \frac{r_e^2 dr_e}{r_e}. \quad (6)$$

Подстановка (6) в (5) дает $E_e(C, R) =$

$$= -Ze^2 \int_0^{r_N} \int_0^{R(\Omega_N)} r_e^2 dr_e r_N^2 dr_N \left[\frac{1}{r_N} - \frac{1}{r_e} \right] \rho_N(\mathbf{r}_N) \rho_e(\mathbf{r}_e) d\Omega_N d\Omega_e - Ze^2 \phi(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где $\phi(\mathbf{r})$ — электрический потенциал всех электронов, создаваемый в центре ядра \mathbf{r} . Этот потенциал, однако, для нас несущественен, потому что он должен быть постоянным. Если бы было не так, то в \mathbf{r} имелось бы электрическое поле $\mathbf{E} = \nabla \phi(\mathbf{r})$ и ядро не могло бы быть в равновесии. Если же $\phi(\mathbf{r}) = \text{const}$, то эта часть энергии не зависит от радиуса ядра.

Таким образом, основной интерес представляет интеграл по объему ядра

$$E_e(C, R) = -Ze^2 \int_{4\pi} d\Omega_N \int_0^{R(\Omega_N)} r_N^2 dr_N \int_0^{r_N} r_e^2 dr_e \left[\frac{1}{r_N} - \frac{1}{r_e} \right] \rho_N(\mathbf{r}_N) \rho_e(\mathbf{r}_e) d\Omega_e. \quad (8)$$

1.1.3. Окончательное выражение для химического сдвига

Поскольку область ядра очень мала по сравнению с областью распределения электронов, то внутри ядра можно принять $\rho_e(\mathbf{r}_e) \approx \rho_e(0) = |\psi(0)|^2$, где $|\psi(0)|^2$ представляет собой суммарный квадрат волновых

функций всех электронов. Подстановка в (8) приводит к выражению

$$E_e(C, R) = \frac{2\pi}{3} Z e^2 |\psi(0)|^2 \langle R_c^2 \rangle, \quad (9)$$

где

$$\langle R_c^2 \rangle = \int_{V_N} d^3 r_N r_N^2 \rho_N(\mathbf{r}_N) \quad (10)$$

— средний квадрат зарядового радиуса. Таким образом, интересующий нас сдвиг связан с изменением не полного, а зарядового радиуса, т.е. с изменением распределения протонов внутри ядра, и если известна разность $|\psi(0)|^2$ в двух различных веществах, то из измеренной разности Δ положений нейтронного резонанса в этих веществах можно найти величину изменения зарядового радиуса $\delta \langle R_c^2 \rangle$ при захвате нейтрона.

Из выражения (9) следует, что вся химия и структура концентрируются в единственной величине $|\psi(0)|^2$, т.е. мы можем писать $E_e(C, R) = E_e(|\psi(0)|^2, R_c)$ и представлять искомый химический сдвиг как $\Delta \equiv \delta_{R,C}^2 E_e(C, R) =$

$$= \frac{2\pi}{3} 100 e^2 \langle R_z^2 \rangle |\psi_z|^2 \frac{Z}{100} \frac{\delta \langle R_c^2 \rangle}{\langle R_z^2 \rangle} \frac{\delta |\psi(0)|^2}{|\psi_z|^2} = E_z A^{2/3} \frac{Z}{100} \frac{\delta \langle R_c^2 \rangle}{\langle R_z^2 \rangle} \frac{\delta |\psi(0)|^2}{|\psi_z|^2}, \quad (11)$$

где введены некие реперные величины $\langle R_z^2 \rangle$ и $|\psi_z|^2$, которые соответствуют условной величине химического сдвига для $Z = 100$

$$E_z = \frac{2\pi}{3} 100 |\psi_z|^2 \frac{\langle R_z^2 \rangle}{A^{2/3}}. \quad (12)$$

Для вычисления E_z мы примем $|\psi_z|^2 = 10^{26} \text{ см}^{-3}$, а для выбора реперного значения $\langle R_z^2 \rangle$ вычислим средний квадрат радиуса ядра, если ядро с массой A представляет собой однородно заряженную сферу радиуса $R_N = 1,2 A^{1/3} 10^{-13} \text{ см}$. Для ядра с таким радиусом и однородной плотностью заряда $\rho_N(r_N) = 3/4\pi R_N^3$ имеем

$$\langle R_z^2 \rangle = \frac{3}{4\pi R_N^3} \int r_N^2 d^3 r_N = \frac{3}{5} R_N^2. \quad (13)$$

Подставив эти значения $\langle R_z^2 \rangle$ и $|\psi_z|^2$ в (12), получим

$$E_z = 100 \frac{3}{5} \frac{2\pi}{3} \frac{4,8^2}{1,6} 1,2^2 \approx 26 \text{ мкэВ}.$$

1.2. Теоретическая оценка $\delta\langle R_c^2 \rangle$

Из (11) видно, что чем тяжелее ядро и чем больше Z , тем больше должен быть наблюдаемый химический сдвиг. Тяжелые ядра имеют низколежащие резонансы и, в большинстве случаев, несимметричную форму.

1.2.1. Модель однородно заряженного деформированного ядра

Рассмотрим простейшую модель однородно заряженного деформированного ядра, поверхность которого описывается выражением

$$R_N(\Omega) = \bar{R}[1 + \beta P_2(\cos \vartheta)], \quad (14)$$

где β — параметр деформации, а $P_l(x)$ — полином Лежандра [8]

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l.$$

В частности, $P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$.

Для определения \bar{R} приравняем объем ядра

$$V_N = \int_{V_N} d^3 r_n = \frac{2\pi \bar{R}^3}{3} \int_{-1}^1 [1 + \beta P_2(\cos \vartheta)]^3 d \cos \vartheta \approx \frac{4\pi \bar{R}^3}{3} (1 + 3\beta^2/5)$$

к $4\pi R_N^3/3$. При интегрировании мы аппроксимировали $(1 + \beta P_2)^3 \approx 1 + 3\beta^2 P_2^2$, поскольку $\beta < 1$, и учли, что [8]

$$\int_{-1}^1 P_l^2(x) dx = \frac{2}{2l+1}, \quad \int_{-1}^1 P_l(x) dx = 0.$$

Из равенства $V_N = 4\pi R_N^3/3$ следует

$$\bar{R} = \frac{R_N}{(1 + 3\beta^2/5)^{1/3}}.$$

При однородном распределении заряда плотность $\rho(r_N)$ равна $3/4\pi R_N^3$. Подставим (14) в (10) и при малых β получим

$$\langle R_c^2 \rangle = \frac{3\bar{R}^5}{10R_N^3} \int_0^1 [1 + \beta P_2(x)]^5 dx \approx \frac{3\bar{R}^5}{5R_N^3} (1 + 2\beta^2) = \frac{3R_N^2}{5} \frac{1 + 2\beta^2}{(1 + 3\beta^2/5)^{5/3}}.$$

Отсюда с учетом (13) следует, что

$$\langle R_c^2 \rangle \approx \langle R_z^2 \rangle (1 + \beta^2) \rightarrow \frac{\delta\langle R_c^2 \rangle}{\langle R_z^2 \rangle} \approx \delta\beta^2.$$

1.2.2. Модель функции Ферми распределения протонов

Зарядовый радиус определяется распределением только протонов, и это распределение может быть неоднородно по ядру. При обработке экспериментальных данных в [2] было использовано распределение [9]

$$\rho_N(r_N, \theta) = \rho_{p0} \frac{1}{1 + \exp(c[r_N\{1 - \beta Y_2^2(\theta)\} - R]/t)}, \quad (15)$$

где $c = 4 \ln 3$, $\beta = 0,253$, $t = 1,46$ фм, $R = 7,15$ фм и коэффициент ρ_{p0} нормирует (15) на единицу. Подстановка (15) в интеграл (10) приводит к величине

$$\langle R_c^2 \rangle = \int_{V_N} d^3 r_N r_N^2 \rho_N(\mathbf{r}_N) = 34 \text{ фм}. \quad (16)$$

1.3. Оценка величины сдвига

Для оценки величины сдвига Δ нужно знать Z , а также величину и изменение β и $|\psi(0)|^2$. Очевидно, что чем больше Z , тем больше сдвиг, и, значит, следует обратить внимание прежде всего на тяжелые ядра. Предварительно, однако, интересно посмотреть на величину сдвига, получаемого в мессбауэровских измерениях.

В мессбауэровских экспериментах величина эффекта приводится в единицах скорости v , с которой поглотитель нужно двигать по отношению к источнику, чтобы добиться совпадения энергии гамма-кванта. Если энергия кванта, излученного источником (ядром, расположенным в окружении C_1), равна $E_{\gamma 1}$, а резонанс поглотителя (ядра, расположенного в окружении C_2) равен $E_{\gamma 2}$, то эти энергии связаны соотношением

$$E_{\gamma 2} = E_{\gamma 1} \left(1 + \frac{v}{c}\right), \quad (17)$$

где c — скорость света.

Из таблицы химических сдвигов [10] следует, что для мессбауэровских ядер величина скорости меняется в диапазоне $(0,1 \div 50)$ мм/с, тогда как энергия гамма-квантов варьируется от 10 до 200 кэВ. Отсюда можно сделать вывод, что величина сдвига

$$\Delta = E_{\gamma} \frac{v}{c}$$

достигает 30 мкэВ. Эта величина мала, но измерима методами нейтронной спектроскопии. При этом можно надеяться, что для нейтронных резонансов, где возбуждение ядер составляет несколько МэВ, величина химического сдвига может быть больше мессбауэровской. Как

мы увидим далее, она действительно может превышать мессбауэровскую и достигать нескольких долей мэВ. Ясно, что она тем больше, чем больше изменение деформации β и чем больше изменение электронной плотности на ядре $\delta|\psi(0)|^2$.

1.3.1. Оценка $\delta\beta^2$

Среди тяжелых ядер наибольших изменений β^2 можно ожидать у делящихся и сильно деформированных ядер, начиная с $A = 152$.

У делящихся ядер, например в модели Струтинского [11], энергия деформации имеет два минимума: при $\beta = 0,3$ и $\beta = 0,6$. При захвате нейтрона может реализоваться смесь этих состояний с $\beta \approx 0,45$, таким образом, в самом благоприятном случае можно ожидать $\delta\beta^2 \approx 0,1$.

У сильно деформированных ядер, начиная с $A = 152$, основному состоянию соответствуют $\beta \approx 0,3$. Высоколежащие возбужденные состояния могут иметь $\beta = 0$. Таким образом, и для тяжелых деформированных ядер можно ожидать $\delta\beta^2 \approx 0,1$.

Конечно, эта оценка очень оптимистична. Результаты мессбауэровских экспериментов показывают, что $\delta\langle R^2 \rangle / \langle R^2 \rangle$ не превышает величины 0,001. В нейтронных экспериментах, тем не менее, можно ожидать бóльших изменений радиуса, поскольку при захвате нейтрона ядро получает энергию на один-два порядка больше, чем при захвате мессбауэровских γ -квантов.

1.3.2. Предварительная оценка $\delta|\psi(0)|^2$

У тяжелых ядер можно ожидать также и увеличения $|\psi(0)|^2$, а значит, и $\delta|\psi(0)|^2$. Одним из главных факторов увеличения является релятивизм электронной волновой функции на ядре. В нерелятивистской квантовой механике главный вклад в $\psi(0)$ дают только s -электроны. В релятивистской квантовой механике вклад дают и s - и p -электроны. Электронная волновая функция, подчиняющаяся уравнению Дирака, состоит из двух компонент: f и g . Первая в нерелятивистском пределе переходит в обычную нерелятивистскую волновую функцию, удовлетворяющую уравнению Шредингера, а вторая дает поправку к ней. В s -состоянии вклад в $|\psi(0)|^2$ на ядре дает компонента f , а в p -состоянии, вернее, в $p_{1/2}$ -состоянии — компонента g . Казалось бы, это не должно существенно изменить нерелятивистский результат. Однако следует

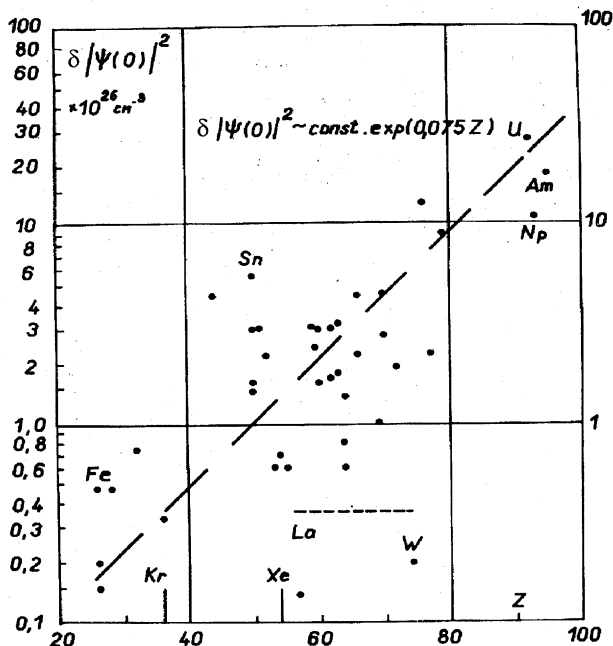


Рис. 1. Изменение электронной плотности на ядре в разных соединениях

иметь в виду, что, например, для точечного ядра решение уравнения Дирака приводит к сингулярной волновой функции на ядре. А именно $|\psi(r)|^2$ вблизи ядра ведет себя как $r^{2(s-1)}$, где $s = \sqrt{1 - \alpha^2 Z^2}$, а $\alpha = 1/137,036$ — постоянная тонкой структуры. Для более сложных потенциалов с протяженным ядром и многоэлектронной оболочкой, как это имеет место в тяжелых атомах, уравнение Дирака удается решить только численно с использованием тех или иных приближений, точность которых, как утверждается в [7], можно оценить величиной $\approx 30\%$.

В таблице [10] приведены всевозможные параметры, относящиеся к изомерным сдвигам в мессбауэровских экспериментах. В частности, там указаны величины $\delta|\psi(0)|^2$ для разных элементов, помещенных в разные вещества. Эти данные приведены на рис. 1, который был составлен самим Ю.Останевичем. Когда Ю.Останевич изобразил все данные на этом рисунке, он заметил, что через множество точек можно провести экспоненту $\delta|\psi(0)|^2 \approx A \exp(0,075Z)$, где A — некая постоянная.

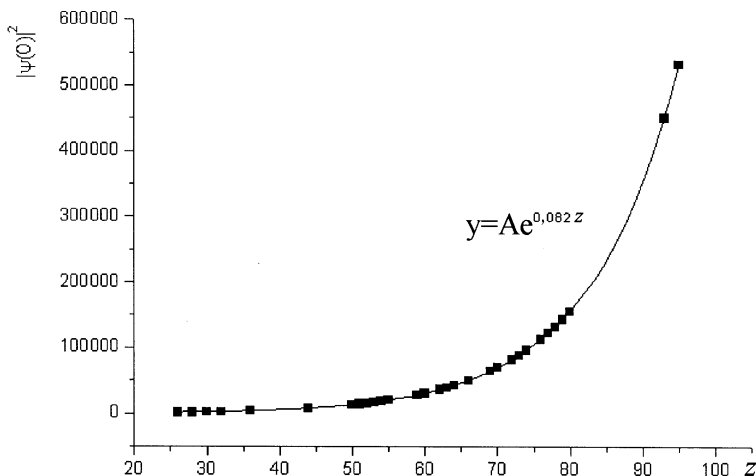


Рис. 2. Полная электронная плотность в единицах 10^{26} см^{-3} на ядрах элементов с атомными номерами от $Z = 26$ до $Z = 95$. Зависимость от Z хорошо описывается экспоненциальной функцией

Через несколько лет после выхода в свет работы [1] были опубликованы таблицы электронных плотностей $|\psi(0)|^2$ на ядре [12], рассчитанные для всех мессбауэровских ядер от $Z = 26$ до $Z = 95$ в приближении Дирака — Фока. На рис. 2 приведены результаты расчетов. Видно, что снова все данные ложатся на экспоненциальную кривую $A \exp(0,082Z)$. Интересно, что число 0,082 в экспоненте очень близко к $\sqrt{\alpha} \approx 0,085$. Таким образом, зависимость $|\psi(0)|^2$ от Z можно описать экспонентой $\approx \exp(\sqrt{\alpha}Z)$.

В таблицах [12] приведены также плотности электронов на ядрах, рассчитанные для ионизованных атомов. Это позволяет оценить разность плотностей $\delta|\psi(0)|^2$ для полных и однократно или двукратно ионизованных атомов. Соответствующие данные представлены на рис. 3. Их снова можно описать экспоненциальной зависимостью, но на этот раз зависимость близка к $\exp(\sqrt{\alpha}Z/2)$.

1.3.3. Определение $\delta|\psi(0)|^2$ в экспериментах

Плотность электронов $\rho(0) = |\psi(0)|^2$ невозможно измерить прямым способом, и ее приходится определять косвенно. В работах [2, 3] это делалось следующим образом. Полная плотность является суммой вкла-

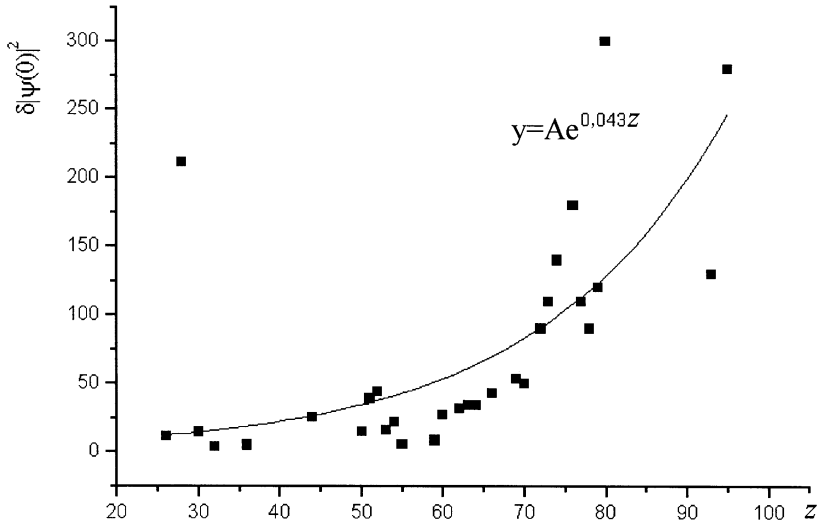


Рис. 3. Изменение электронной плотности на ядрах элементов с атомными номерами от $Z = 26$ до $Z = 95$ при отрыве одного или двух валентных электронов. Значения по оси ординат приведены в единицах $a_0^{-3} = 0,7 \cdot 10^{25} \text{ см}^{-3}$, где $a_0 = 0,5292 \text{ \AA}$ — радиус первой боровской орбиты в атоме водорода

дов от всех атомных орбиталей. Орбиталь $\psi_{n,l,m}$ с квантовыми числами n, l, m дает вклад $\rho_{n,l,m}$, который определяется численными расчетами [12, 13]. В каждом соединении C вклад каждой орбитали в $\delta|\psi(0)|^2$ определяется ее заселенностью, обозначаемой $X_{n,l,m}(C)$. При этом полная плотность представляется в виде

$$\rho(0) = \sum_{n,l,m} X_{n,l,m}(C) \rho_{n,l,m},$$

а ее изменение $\delta\rho(0) = \delta|\psi(0)|^2$ определяется различием заселенностей в разных химических соединениях:

$$\delta\rho(0) = \sum_{n,l,m} \delta X_{n,l,m} \rho_{n,l,m}, \quad \delta X_{n,l,m} = X_{n,l,m}(C_2) - X_{n,l,m}(C_1).$$

В этом выражении $\rho_{n,l,m}$ определяются численно [12], а $\delta X_{n,l,m}$, в принципе, можно найти из каких-то других экспериментальных данных.

Таковыми экспериментальными данными могут быть сдвиги рентгеновских линий K , L и M . Энергия рентгеновского излучения E_γ определяется переходами между двумя состояниями a и b : $E_\gamma = E_b - E_a$.

Разность двух термов $E_{a,b}$ меняется на величину $\delta E_{n,l,m}$ при удалении электрона с орбитали n, l, m . Это изменение определяется численными расчетами [12, 13]. Разные химические соединения характеризуются разными заселенностями $X_{n,l,m}(C)$ n, l, m -орбиталей, и потому энергии рентгеновского излучения в разных веществах различаются на величину

$$\delta E_{\gamma} = \sum_{n,l,m} \delta X_{n,l,m} \delta E_{n,l,m}.$$

Измерив различие энергий нескольких рентгеновских линий двух химических веществ, мы можем найти изменения $\delta X_{n,l,m}$, опираясь на рассчитанные значения $\delta E_{n,l,m}$. Найденные $\delta X_{n,l,m}$ затем используются для определения изменения плотности $\rho(0)$ в химических сдвигах. В частности, для урана разность $\delta|\psi(0)|^2$ для 4- и 6-валентного атома составила $(9,4 \pm 1,96) \cdot 10^{26} \text{ см}^{-3}$.

О корректности подобного определения $\delta X_{n,l,m}$ можно судить еще и по другим экспериментальным данным, например по парциальной ширине распада изомерного состояния в канал внутренней конверсии (изотоп ^{235}U) или по мессбауэровским химическим сдвигам изовалентных урану ионов нептуния.

Относительная неопределенность в определении величины $\delta\rho(0)$ оценивается [2] на уровне $15 \div 20 \%$.

Таким образом, как резюме к данному пункту по оценке величины эффекта мы можем сказать, что в нейтронных экспериментах на тяжелых атомах действительно можно было ожидать химических сдвигов порядка единиц или долей мэВ. Однако необходимо учесть и мешающие факторы, к которым мы теперь и переходим.

1.4. Температурные эффекты

При переходе от вещества к веществу положение резонанса меняется не только из-за химического сдвига. Имеется еще и сдвиг, связанный с энергией отдачи. Связь атома с другими атомами в разных веществах различна, и потому энергия отдачи тоже может быть различной. Это различие имитирует химический сдвиг, и его нужно либо исключать, либо принимать во внимание. Его можно в определенной мере контролировать, поскольку энергия отдачи зависит от температуры. Последнее обстоятельство позволяет называть такой сдвиг температурным сдвигом.

Помимо температурного сдвига, связанного с энергией отдачи, имеется еще и температурное уширение $\delta\Gamma$, которое тоже влияет на изменение химического сдвига. Наша задача состоит в том, чтобы оценить величину обоих эффектов.

1.4.1. Энергия отдачи

Если ядро с массой M и скоростью \mathbf{w} (энергией $E_N(w) = Mw^2/2$) захватывает нейтрон, обладающий скоростью \mathbf{v} , то после захвата образуется ядро с массой $M + m$, которое обладает скоростью \mathbf{u} и энергией $E'_N(w)$, равными

$$\mathbf{u} = \frac{M\mathbf{w} + m\mathbf{v}}{M + m}, \quad E'_N(w) = (M + m)\frac{u^2}{2} = \frac{(M\mathbf{w} + m\mathbf{v})^2}{2(m + M)} \quad (18)$$

соответственно. Таким образом, энергия ядра меняется на величину

$$E_{\text{recoil}}(w) = E'_N(w) - E_N(w) = \frac{m}{m + M}[E_n - E_N(w) + M\mathbf{w}\mathbf{v}], \quad (19)$$

где $E_n = mv^2/2$ — энергия налетающего нейтрона. Отсюда видно, что для возбуждения резонанса нейтрон должен иметь избыток энергии, равный $E_{\text{recoil}}(w)$, а значит, видимое положение резонанса будет не E_0 , а $E_0 + E_{\text{recoil}}(w)$.

Но энергия отдачи зависит от скорости ядра, поэтому необходимо знать распределение ядер по скоростям, чтобы найти и среднюю энергию отдачи, которая определит средний сдвиг резонанса $\langle E_{\text{recoil}} \rangle$, и средний квадрат разброса по энергии отдачи, который определит его дополнительное уширение $\delta\Gamma$.

Пусть скорости первоначальных ядер распределены по закону $W(\mathbf{w})$. Найдем среднюю энергию отдачи. Если распределение $W(\mathbf{w}) = W(w)$ изотропно, то при усреднении скалярное произведение $\mathbf{w}\mathbf{v}$ выпадает и мы получаем

$$\langle E_{\text{recoil}} \rangle = \frac{m}{m + M} \int d^3w W(\mathbf{w})(E_n - E_N(w) + M\mathbf{w}\mathbf{v}) = \frac{m}{m + M}(E_n - \langle K \rangle), \quad (20)$$

где $\langle K \rangle$ обозначает среднюю кинетическую энергию ядра

$$\langle K \rangle \equiv \langle E_N \rangle = \int d^3w W(w) \frac{Mw^2}{2} \quad (21)$$

до захвата. Соответственно, средняя кинетическая энергия ядра после захвата равна

$$\langle E'_N \rangle = E_{\text{recoil}} + \langle E_N \rangle \equiv E_{\text{recoil}} + \langle K \rangle = \frac{M}{m+M} \langle K \rangle + \frac{m}{m+M} E_n. \quad (22)$$

Величина $\langle K \rangle$ может быть различна в разных веществах. Это различие и имитирует химический сдвиг. Из формулы (20) мы немедленно получаем величину имитирующего эффекта

$$\Delta' = \frac{m}{m+M} (\langle K(C_2) \rangle - \langle K(C_1) \rangle), \quad (23)$$

где указана зависимость средней кинетической энергии ядра от химического окружения.

1.4.2. Разброс энергии отдачи

Чтобы вычислить уширение линии, обусловленное отдачей, нужно вычислить величину

$$\begin{aligned} \delta E_{\text{recoil}}^2 &= \langle E_{\text{recoil}}^2 \rangle - \langle E_{\text{recoil}} \rangle^2 = \\ &= \int d^3w W(w) \frac{m^2}{(m+M)^2} [E_n + M\mathbf{w}\mathbf{v} - E_N(w)]^2 - \left[\frac{m(E_n - \langle K \rangle)}{m+M} \right]^2 = \\ &= \frac{mM}{(m+M)^2} \left[\frac{4}{3} \langle K \rangle E_n + \frac{m}{M} (\langle K^2 \rangle - \langle K \rangle^2) \right] \approx \frac{4}{3} \frac{m}{M} \langle K \rangle E_n, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\langle K^2 \rangle = \int W(w) dw \left(\frac{Mw^2}{2} \right)^2, \quad (25)$$

и мы пренебрегли вторым членом в скобках (24), что можно сделать при малых m/M и достаточно больших $E_n \approx E_0(C)$. В результате получаем выражение для разности ширин в двух веществах:

$$\delta \Gamma^2 \approx \frac{4}{3} \frac{m}{M} E_0 (\langle K(C_2) \rangle - \langle K(C_1) \rangle). \quad (26)$$

1.4.2.1. Фононы в некогерентном и дебаевском приближении

Формулы (23) и (24) позволяют определить и исключить температурные эффекты из химического сдвига, если известны распределения атомов по скоростям в разных соединениях. Нет никакого труда рассчитать указанные величины, например, для максвелловского распределения в одноатомном газе, но этот случай неинтересен, поскольку в

одноатомных газах нет химического сдвига. Поэтому мы сразу рассмотрим модель твердого тела, в котором движения атомов представляют собой колебания около положений равновесия, которые описываются фононами. Для простоты мы ограничимся только некогерентным приближением и дебаевским спектром. В этом случае $W(\mathbf{w}) = g(\omega)$ — фононный спектр, который в дебаевском приближении равен $3\omega^2/\omega_D^3$, где ω_D — частота Дебая, связанная с температурой Дебая T_D соотношением $T_D = \hbar\omega_D/k_B$.

Кинетическая энергия по теореме вириала равна половине полной, или, с учетом числа степеней свободы:

$$\frac{Mw^2}{2} = \left(n(T) + \frac{1}{2}\right) \frac{3\hbar\omega}{2}, \quad \text{где} \quad n(T) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}$$

— число колебаний с частотой ω . Подстановка в (21) дает

$$\langle K \rangle = \frac{3}{4} \int_0^{\omega_D} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \hbar\omega g(\omega) d\omega. \quad (27)$$

При низкой температуре можно заменить $\coth(\hbar\omega/2k_B T) = 1$, и в результате получается $\langle K \rangle = (9/16)k_B T_D$. Это означает, что средняя кинетическая энергия не зависит от температуры и определяется нулевыми колебаниями. Соответственно, разность кинетических энергий в двух веществах, имитирующая химический сдвиг, равна

$$\Delta' = \frac{9m}{16M} k_B (T_{2D} - T_{1D}).$$

Если $m/M \approx 0,01$, $T_{2D} - T_{1D} \approx 100$ К, то $\Delta' \approx 50$ мкэВ.

При высокой температуре

$$\langle K \rangle \approx \frac{3}{2} k_B T \left(1 + \frac{1}{20} \frac{T_D^2}{T^2}\right),$$

поэтому имитирующий сдвиг равен

$$\Delta' = \frac{3m}{40M} k_B (T_{2D} - T_{1D}) \frac{T_{2D} + T_{1D}}{T}.$$

Если $T = 3(T_{1D} + T_{2D})$, то при тех же остальных параметрах, что и выше, имеем $\Delta' \approx 2$ мкэВ. Таким образом, в противоположность мессбауэровским экспериментам нейтронные эксперименты выгоднее проводить при высокой температуре образцов.

1.4.2.2. Фононы в эйнштейновском приближении

В этом случае $g(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$. Подстановка в (27) дает

$$\langle K \rangle = \frac{3}{4} \hbar \omega_0 \coth \left(\frac{\hbar \omega_0}{2k_B T} \right),$$

и разность $\langle K(C) \rangle$ определяется разностью $\omega_0(C)$.

1.4.2.3. Двухчастотная эйнштейновская модель

В экспериментальных работах [2, 3] использовалась модель двухатомной решетки, в которой два атома имеют сильно различающиеся массы, а частотный спектр задается выражением

$$g(\omega) = a_1 \delta(\omega - \omega_1) + a_2 \delta(\omega - \omega_2), \quad a_1 + a_2 = 1.$$

С этим спектром выражение (27) дает

$$\langle K \rangle = \frac{3}{4} \hbar \left[a_1 \omega_1 \coth \left(\frac{\hbar \omega_1}{2k_B T} \right) + a_2 \omega_2 \coth \left(\frac{\hbar \omega_2}{2k_B T} \right) \right],$$

и $\delta \langle K(C) \rangle$ определяется теперь изменением трех параметров: a_1 , ω_1 и ω_2 .

1.4.3. Учет температурных эффектов

Поскольку температурные сдвиг и уширение зависят только от одной и той же величины $\langle K \rangle$, то, измеряя и уширение и сдвиг, можно исключить температурные эффекты и получить химический сдвиг в чистом виде. При этом совершенно неважно, какая функция $W(w)$ принимается в качестве модели для распределения атомов по скоростям.

Действительно, согласно (26)

$$\delta \Gamma^2 = \frac{4}{3} \frac{1}{A} E_n \delta \langle K(C) \rangle.$$

Соответственно, температурный сдвиг, согласно (23), равен

$$\frac{1}{A} \delta \langle K(C) \rangle = \frac{3}{4} \frac{\delta \Gamma^2}{E_n} \approx \frac{3}{4} \frac{\delta \Gamma^2}{E_0}.$$

Теперь ясно, что можно наблюдать в эксперименте (см. рис. 4) и как находить химические сдвиги по экспериментальным данным.

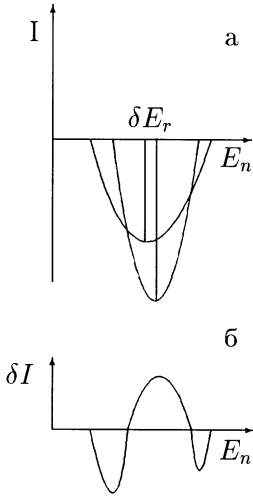


Рис. 4. а) При пропускании образцов с ураном наблюдаются резонансные провалы в зависимости интенсивности прошедшего пучка от энергии E_n нейтронов. У двух образцов одинаковой толщины по количеству ядер урана, но с разным химическим составом провалы имеют несколько различающиеся ширины и положения минимумов. б) Разность интенсивностей, показанных на рис. 4,а. При правильной подгонке площади пиков на рис. 4,а одинаковы, а площадь под разностной кривой на рис. 4,б равна нулю. Асимметрия разностной кривой характеризует смещение резонанса δE_0

1.5. Изомерные сдвиги рентгеновских линий

Выше была рассмотрена возможность измерений химических сдвигов нейтронных резонансов, инициированная работой [1]. Было бы несправедливо умолчать при этом о другой работе [4], в которой рассматривался химический сдвиг рентгеновских линий возбужденных ядер.

Энергия взаимодействия (9) влияет не только на положение нейтронных резонансов, но и на энергетические уровни электронов, а значит, и на оптические и рентгеновские переходы внутри атома. При переходе электрона между двумя уровнями меняется плотность электронов $|\psi(0)|^2$ на ядре, поэтому взаимодействие (9) дает поправку к энергии перехода, вычисленной без учета (9). Эта поправка меняется при изменении радиуса ядра. В частности, она различна для различных изотопов, поскольку $R \propto A^{2/3}$. Разность энергии внутриатомных переходов у разных изотопов одного и того же элемента называется изотопическим сдвигом. Она хорошо известна и измерена для многих изотопов.

Радиус меняется также и при возбуждении ядра. Разность энергии внутриатомных переходов для возбужденного и невозбужденного ядра называется изомерным сдвигом атомных линий. Для измерения этого сдвига необходимо, чтобы ядро достаточно долго жило в возбужденном состоянии. Время жизни оптических переходов больше времени жизни рентгеновских и составляет около 10^{-7} с. Соответственно, ядро

должно оставаться в возбужденном состоянии намного дольше. Большинство же ядер сбрасывают свои возбуждения значительно быстрее — за $10^{-10} \div 10^{-14}$ с, поэтому наблюдать оптические изомерные переходы очень трудно.

В работе [4] предлагается наблюдать рентгеновские переходы, время жизни которых составляет $10^{-16} \div 10^{-17}$ с. Такие переходы можно наблюдать при K -захвате и при внутренней конверсии, когда возбужденное состояние ядра возникает одновременно с возбуждением атома. Оценки величин изомерных сдвигов рентгеновских линий, основанные на опубликованных таблицах волновых функций, составляют от нескольких электронвольт до 150 эВ. Они значительно больше химических сдвигов нейтронных резонансов потому, что сопровождаются большим изменением $\delta|\psi(0)|^2$. Действительно, при K -захвате удаляется электрон, который дает максимальный вклад в $\delta|\psi(0)|^2$. Сдвиги ≈ 100 эВ в рентгеновских линиях в принципе наблюдаемы, но, к сожалению, никаких экспериментов в этом направлении пока проведено не было.

1.6. Эксперименты

Теоретическое исследование [1] химических сдвигов нейтронных резонансов показало, что в тяжелых ядрах они вполне доступны измерениям, и такие измерения были проведены в Лаборатории нейтронной физики Объединенного института ядерных исследований на импульсном реакторе ИБР-30, работающем в бустерном режиме с шириной вспышки 4 мкс.

В 1976 году в лаборатории была разработана техника измерения малых сдвигов нейтронных резонансов, которая была использована для определения магнитных моментов компаунд-состояний ядер [14].

Такая же методика была использована и для измерений химических сдвигов. Схема эксперимента показана на рис. 5. Эксперименты проводились с металлическим ураном и с соединениями урана. Уран был выбран потому, что его ядро сильно деформированно, а его атом может участвовать в различных химических соединениях. Последнее позволяет варьировать электронную плотность на ядре в широких пределах. В качестве соединений использовались UO_2 , U_3O_8 , UO_3 , $\text{UF}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{UO}_2(\text{NO}_3) \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. В этих соединениях атом урана окисляется и теряет

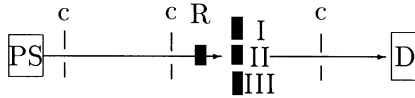


Рис. 5. Схема эксперимента. Пучок нейтронов от импульсного реактора ИБР-30 (PS) коллимируется коллиматорами (с), попеременно пропускается через каждую из трех мишеней (I, II, III) и регистрируется детектором (D). Анализ по времени пролета позволяет определить энергию прошедших нейтронов и измерить зависимость пропускания образца от энергии. Разность пропусканий двух образцов позволяет определить сдвиг положения резонансов и изменение их ширины. Кроме изучаемого образца в пучке все время для контроля находится образец ^{159}Tb или ^{181}Ta (R), положения резонансов которого не должны меняться при замене образцов с ураном

от 4 до 6 электронов.

В работе [2] изучался резонанс 6,67 эВ изотопа ^{238}U , а в работе [3] — резонанс 5,2 эВ изотопа ^{234}U и 8 резонансов, от 1,1 до 12,4 эВ, изотопа ^{235}U .

Эксперименты проводились по методу времени пролета. На рис. 6 приведен фрагмент спектра [2], измеренного на изотопе ^{238}U . Кроме резонансов урана здесь видны также резонансы элемента ^{159}Tb , который наряду с образцами урана постоянно находился в нейтронном пучке. Резонансы тербия служили реперными точками, поскольку их положения не меняются при перестановке образцов урана с различным химическим составом.

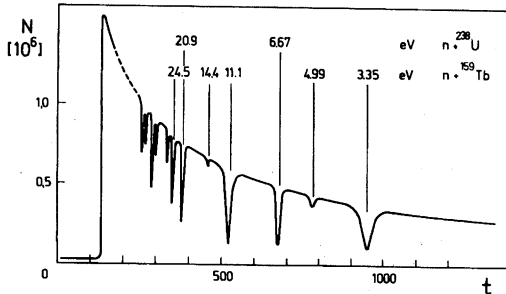


Рис. 6. Фрагмент спектра [2] по времени пролета: t — номер канала, N — число отсчетов в канале. Ширина канала составляет 2 мкс

Насколько этот эксперимент труден, можно судить, например, по следующему обстоятельству. Ширина резонанса 6,67 эВ ^{238}U составляет $\approx 0,1$ эВ и охватывает 30 временных каналов в спектре по вре-

мени пролета. Величина же химического сдвига составляет несколько десятых долей мЭВ, что эквивалентно сдвигу по времени пролета всего на несколько сотых долей одного канала. Уверенно зафиксировать такой сдвиг кажется на первый взгляд безнадежной задачей, и все же она была успешно решена.

1.6.1. Результаты

Для всех исследованных изотопов вклад мультипольных взаимодействий оказался несущественным, поэтому все химические сдвиги можно было отнести к скалярному взаимодействию (11), обусловленному изменением зарядового радиуса ядра.

Однако следует иметь в виду, что при захвате нейтрона изотопом ${}^A\text{U}$ получается изотоп ${}^{A+1}\text{U}$. Квадраты зарядовых радиусов у этих двух изотопов различаются, и это различие $\delta_1\langle R_c^2 \rangle = \langle R_c^2 \rangle_{A+1} - \langle R_c^2 \rangle_A$, где индекс указывает атомный вес изотопа, определяется по изотопическому сдвигу оптических спектров [15]. Поэтому измеренное изменение $\delta\langle R_c^2 \rangle = \langle R_c^2 \rangle_{A+1}^* - \langle R_c^2 \rangle_A$, где верхний значок * обозначает возбужденное состояние, следует поправить на величину $\delta_1\langle R_c^2 \rangle$, чтобы получить изменение радиуса при возбуждении изотопа $A + 1$ на энергию связи нейтрона 4,8 МэВ:

$$\delta^*\langle R_c^2 \rangle = \langle R_c^2 \rangle_{A+1}^* - \langle R_c^2 \rangle_{A+1} = \delta\langle R_c^2 \rangle - \delta_1\langle R_c^2 \rangle.$$

После анализа экспериментальных данных было получено, что при возбуждении ядра урана-239 на 4,8 МэВ квадрат его зарядового радиуса уменьшается: $\delta\langle R_c^2 \rangle = -1,7_{-0,8}^{+1,2}$ фм². В основном состоянии, как следует из (16), квадрат его зарядового радиуса равен $\langle R_c^2 \rangle_{238} = 34$ фм². Величина $\delta_1\langle R_c^2 \rangle$ в данном случае составляла 0,05 фм² и могла не учитываться.

Сильное уменьшение радиуса ${}^{238}\text{U}$ было сюрпризом. Некоторого уменьшения, $-0,2$ фм², можно было ожидать на основании теоретических исследований Г.Г.Бунатяна [16, 17], однако наблюдаемое значение оказалось значительно больше предсказываемого.

В резонансе 5,16 эВ ${}^{234}\text{U}$ было зафиксировано $\delta^*\langle R_c^2 \rangle_{235} = -0,46 \pm 0,25$ фм², а $\delta^*\langle R_c^2 \rangle_{236}$, усредненное по 8 резонансам изотопа ${}^{235}\text{U}$, оказалось равным $-0,18 \pm 0,1$ фм². Кроме среднего значения для 8 резонансов можно найти также флуктуацию или среднеквадратичное отклонение от среднего. Оно составило $0,1_{-0,1}^{+0,2}$ фм². Последние три зна-

чения хорошо согласуются с предсказаниями статистической теории Г.Г.Бунатяна [18].

Мы не будем анализировать следствия из полученных результатов для теории ядра (некоторые рассуждения на этот счет можно найти в работах [2, 3]), поскольку они не имеют непосредственного отношения к работам Ю.Останевича, а перейдем к обсуждению теории нейтронных резонансов, которую мы часто затрагивали в беседах с ним, но так и не довели до разумного результата.

2. Возможный вариант теории нейтронных резонансов

Теория нейтронных резонансов, казалось бы, должна чрезвычайно просто строиться на основе представления о ядерном потенциале. Попробуем посмотреть, возможно ли это в принципе, и проведем сравнение получающихся результатов с теоретическими исследованиями, изложенными в книге Лейна и Томаса [19].

Представим себе, что ядро описывается сферическим потенциалом $u(r)\hbar^2/2m$, где m — масса нейтрона. В дальнейшем множитель $\hbar^2/2m$ мы будем опускать и потенциалом называть величину u . В рамках данной статьи мы можем ограничиться только простейшими случаями упругого s -рассеяния, полагая, что все каналы ядерных реакций кроме (n, n) -рассеяния описываются мнимой частью потенциала. Кроме того, мы ограничимся простейшими потенциалами, не претендуя на описание конкретных ядер или конкретных резонансов. Нам будет важно только выяснить, возможно ли вообще получить резонансы и как ведет себя с энергией фаза рассеяния.

Рассмотрим уравнение Шредингера со сферически-симметричным потенциалом $u(r)$

$$[\Delta - u(r) + k^2]\psi(\mathbf{r}) = 0.$$

Подставив в это уравнение $\psi(\mathbf{r}) = R_l(k, r)Y_l^m(\Omega)$ и отделив угловую часть, получим радиальное уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} + u - k^2 \right] R_l = 0.$$

Ограничимся только s -рассеянием, т.е. $l = 0$, и подставим $R_0(k, r) = y(k, r)/r$. Получим одномерное уравнение для приведенной радиальной

функции $y(k, r)$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - u \right] y(k, r) = 0. \quad (28)$$

Это уравнение справедливо на полуоси $r \geq 0$. Его можно распространить на всю ось, если положить $u(r) = \infty$ при $r < 0$.

Одномерные задачи рассеяния легко решаются алгебраическим методом, развитым в [20, 21] и для удобства читателей кратко изложенным в приложении.

Пусть $u(r) = 0$ при $r > r_1$, тогда решение уравнения (28) при $r \geq r_1$ может быть представлено в виде

$$y(k, r) = \exp(-ik[r - r_1]) + \rho(k) \exp(ik[r - r_1]), \quad (29)$$

содержащем падающую $\exp(-ik[r - r_1])$ и отраженную $\exp(ik[r - r_1])$ плоские волны с фазами, равными нулю в точке r_1 .

Обычно рассеяние описывается не амплитудой отражения $\rho(k)$, а матрицей рассеяния $S(k)$, которая равна амплитуде уходящей плоской волны $\exp(ikr)$, когда падающая равна $-\exp(-ikr)$, т.е. решение (29) уравнения (28) представляется в виде

$$y(k, r) = -\exp(-ikr) + S(k) \exp(ikr). \quad (30)$$

Поскольку функция $y(k)$ определена только с точностью до произвольного фазового множителя, то сравнение (29) и (30) показывает, что

$$S = -\exp(-2ikr_1)\rho, \quad (31)$$

и, соответственно, амплитуда отражения равна

$$f = \frac{1}{2ik}(S - 1) = \frac{-1}{2ik}(e^{-2ikr_1}\rho + 1). \quad (32)$$

При $u = 0$ имеем $\rho(k) = -\exp(2ikr_1)$, откуда следует $S = 1$, $f = 0$, т.е. при отсутствии потенциала никакого рассеяния нет, что и естественно.

Из (31) следует, что амплитуда упругого рассеяния не превосходит величины $|f_{\text{el max}}| = 1/k = \lambda/2\pi$ (λ — длина волны нейтрона), которая достигается при $S = -1$. Амплитуда же рассеяния в другие каналы, которые можно описать мнимой частью потенциала, не превышает величины $|f_{\text{inel max}}| = 1/2k = \lambda/4\pi$, которая достигается при $\rho = S = 0$.

Рассмотрим теперь несколько простейших случаев.

2.1. Потенциальная яма

В случае простой потенциальной ямы (рис. 7) мы имеем собственные уровни внутри ямы и резонансы при рассеянии.

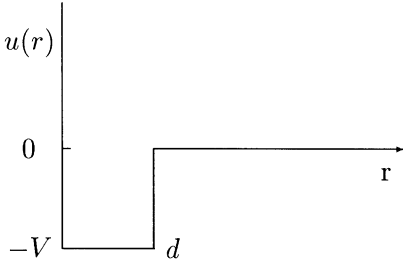


Рис. 7. Сферически-симметричная потенциальная яма глубиной V и шириной d . Ограничение полусью $r > 0$ эквивалентно введению бесконечного потенциала при $r \leq 0$. Амплитуда отражения от бесконечного потенциала равна -1

2.1.1. Уровни энергии

Уровни определяются следующим образом. Представим себе волну $\exp(-ik_v r)$ внутри ямы, распространяющуюся к точке $r = 0$ с волновым вектором k_v относительно дна ямы. В точке $r = 0$ она имеет амплитуду, равную 1. После отражения от точки $r = 0$ с амплитудой $\rho(0) = -1$ волна распространяется к точке $r = d$. При этом она приобретает фазовый множитель $\exp(ik_v d)$. После отражения от точки $r = d$ с амплитудой $\rho_{v0}(d) = (k_v - ik')/(k_v + ik')$, где $k' = \sqrt{V - k_v^2}$ и индекс v_0 означает отражение от границы раздела со стороны потенциала V , волна снова распространяется в направлении к $r = 0$ и в точке $r = 0$ приобретает дополнительный фазовый множитель $\exp(ik_v d)$. Таким образом, амплитуда волны около точки $r = 0$ становится равной $-\rho_{v0} \exp(2ik_v d)$. Однако в стационарном состоянии, а волновая функция собственного уровня k_v обязана быть стационарной, новое значение амплитуды $-\rho_{v0} \exp(2ik_v d)$ должно совпадать с исходным значением 1. Это условие приводит к уравнению на собственное значение энергии

$$-\frac{k_v - i\sqrt{V - k_v^2}}{k_v + i\sqrt{V - k_v^2}} \exp(2ik_v d) \equiv -\exp(2i\chi_v) = 1, \quad (33)$$

где

$$\chi_v = k_v d - \arctan\left(\frac{\sqrt{V - k_v^2}}{k_v}\right). \quad (34)$$

Уравнение (33) может быть также представлено в виде

$$\chi_v = k_v d - \arctan\left(\frac{\sqrt{V - k_v^2}}{k_v}\right) = (2n - 1)\pi/2, \quad (35)$$

где n — целое неотрицательное число. Наинижнему уровню отвечает $n = 0$, что соответствует $k_v = 0$, т.е. частице, лежащей на дне. Однако волновая функция на этом уровне равна нулю, т.е. частица не может на нем находиться.

При $n > 0$ уровни энергии равны $E_n = k_v^2(n) > 0$, если измерять их от дна ямы, или $E_n = k^2 = k_v^2(n) - V < 0$, если измерять их от нулевого уровня энергии вакуума. Полное число уровней равно конечному целому числу

$$n_m = \text{Int}\left(\frac{\sqrt{V}d}{\pi} + \frac{1}{2}\right),$$

где $\text{Int}(x)$ — целая часть числа x . При $Vd^2/\pi^2 = 100$ имеем 10 связанных состояний.

2.1.2. Рассеяние

Резонансы определяются при рассеянии, т.е. при $k^2 = k_v^2 - V > 0$. В рассматриваемом здесь s -рассеянии волновую функцию $y(k, r)$ вне ямы можно согласно (29) представить в виде

$$y(k, r) = \exp(-ik[r - d]) + \rho_v(k) \exp(ik[r - d]), \quad (36)$$

где ρ_v — амплитуда отражения от потенциальной ямы глубиной V и шириной d с бесконечным потенциалом в точке $r = 0$:

$$\rho_v = \rho_{0v} - \frac{[1 - \rho_{0v}^2]e^{2ik_v d}}{1 - \rho_{0v}e^{2ik_v d}} = -e^{2ik_v d} \frac{1 - \rho_{0v}e^{-2ik_v d}}{1 - \rho_{0v}e^{2ik_v d}} = -e^{2i\chi_v}, \quad (37)$$

$$\rho_{0v} = \frac{k - k_v}{k + k_v}, \quad \chi_v = k_v d + \arctan\left(\frac{\rho_{0v} \sin(2k_v d)}{1 - \rho_{0v} \cos(2k_v d)}\right), \quad (38)$$

$\rho_{0v} = -\rho_{v0} < 0$ — амплитуда отражения от потенциальной ступеньки глубины v , а $k_v = \sqrt{k^2 + V}$ — волновой вектор внутри ямы. В (38) учтено, что амплитуда отражения от точки $r = 0$ равна $\rho_0 = -1$. Если $V = 0$, то $\chi_v = 2kd$ и $\rho_v = -\exp(2ikd)$.

Матрица и амплитуда рассеяния, как следует из (31,32), равны соответственно

$$S = -e^{-2ikd} \rho_v(k) = e^{2i\delta_v}, \quad f = \frac{1}{k} e^{i\delta_v} \sin(\delta_v), \quad \delta_v = \chi_v - kd. \quad (39)$$

Из (38) и (39) следует, что фаза рассеяния δ_v равна

$$\delta_v = (k_v - k)d - \arctan \left(\frac{\rho_{v0} \sin(2k_v d)}{1 + \rho_{v0} \cos(2k_v d)} \right). \quad (40)$$

Это выражение ясно показывает, что с ростом k фаза рассеяния убывает: $\delta_v(k) \rightarrow 0$. Действительно, при $k^2 \gg V$ первое слагаемое ведет себя как $Vd/2k$, а второе слагаемое осциллирует около нуля, поскольку ρ_{v0} убывает как $V/4k^2$. При $k = 0$ имеем $\rho_{v0} = 1$ и $\delta_v(0) = \sqrt{Vd^2} - \arctan(\tan(k_v d))$. Если $\sqrt{Vd^2} = N\pi - \pi/2 + \alpha$, где $0 \leq \alpha \leq \pi$, то $\arctan(\tan(k_v d)) = -\pi/2 + \alpha$ и фаза $\delta_v(k)$ убывает до нуля начиная от значения $\delta_v(0) = \pi N$, где N — число связанных состояний в яме.

Резонансы соответствуют максимальным значениям амплитуды $|f|$ и значениям фазы $\delta_v(k) \approx (n - 1/2)\pi$. Поскольку фаза $\delta_v(k)$ с ростом k убывает, то число резонансов в точности равно числу связанных состояний в яме. Этот результат показывает, что утверждение [19, с. 62] о том, что количество резонансов в прямоугольной яме бесконечно, неправильно. Справедливости ради следует, однако, отметить и другое утверждение [19, с. 63], где сказано, что "ядерная система может иметь конечное число резонансов или не иметь их вовсе." Отсюда следует, что вопрос о соотношении между резонансами R -матричной теории и реальной физической системы пока еще не достаточно ясен¹.

2.2. Сферический прямоугольный барьер

Для прямоугольного потенциального барьера высотой W и шириной l с внутренней областью радиуса d , показанного на рис. 8, приведенная радиальная волновая функция s -рассеяния записывается в виде (29), где

$$\rho(k) = \left(\rho_w + \frac{-\tau_w^2 \exp(2ikd)}{1 + \rho_w \exp(2ikd)} \right) = \frac{\rho_w + [\rho_w^2 - \tau_w^2] \exp(2ikd)}{1 + \rho_w \exp(2ikd)}, \quad (41)$$

а ρ_w, τ_w — амплитуды отражения и пропускания плоских волн потенциалом высотой W и шириной l . В формуле (41) учтено, что амплитуда отражения от точки $r = 0$ равна -1 .

Амплитуды $\rho_w(k)$ и $\tau_w(k)$ равны [20, 21]

$$\rho_w = \frac{\rho_{0w}[1 - e^{2ik_w l}]}{1 - \rho_{0w}^2 e^{2ik_w l}}, \quad \tau_w = \frac{[1 - \rho_{0w}^2]e^{ik_w l}}{1 - \rho_{0w}^2 e^{2ik_w l}}, \quad \rho_{0w} = \frac{k - k_w}{k + k_w}, \quad (42)$$

¹Я благодарен Ф.Гарееву, обратившему мое внимание на это обстоятельство.

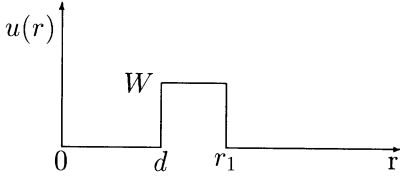


Рис. 8. Сферически-симметричный потенциал, содержащий кольцевой барьер высотой W и шириной $l = r_1 - d$ вокруг свободной сферической области радиуса d . Ограничение полуосью $r > 0$ эквивалентно введению бесконечного потенциала при $r \leq 0$. Амплитуда отражения от бесконечного потенциала равна -1

где $k_w = \sqrt{k^2 - W}$ — волновой вектор над барьером, а ρ_{0w} — амплитуда отражения от потенциальной ступеньки высотой W . При $W = 0$ имеем $k_w = k$, $\rho_{0w} = 0$ и $\tau_w = \exp(ikl)$.

2.2.1. Подбарьерное отражение

При $k^2 < W$ имеем $k_w = ik'_w = i\sqrt{W - k^2}$. Поэтому $\rho_{0w} = \exp(2i\chi_{0w})$, где $\chi_{0w} = -\arctan(k'_w/k)$, и фаза $2\chi_{0w}$ возрастает от $-\pi$ до 0 при возрастании k от $k = 0$ до $k = \sqrt{W}$. В этом случае выражения ρ_w и τ_w можно представить в виде

$$\rho_w = \{\rho_w\}e^{i\chi_w}, \quad \tau_w = i\{\tau_w\}e^{i\chi_w},$$

$$\chi_w = 2\chi_{0w} + \arctan\left(\frac{\exp(-2k'_w l) \sin(4\chi_{0w})}{1 - \exp(-2k'_w l) \cos(4\chi_{0w})}\right), \quad (43)$$

где введены величины

$$\{\rho_w\} = \frac{1 - \exp(-2k'_w l)}{\sqrt{[1 - \exp(-2k'_w l)]^2 + 4 \exp(-2k'_w l) \sin^2(2\chi_{0w})}}, \quad (44)$$

$$\{\tau_w\} = \frac{-2 \sin(\chi_{0w}) \exp(-k'_w l)}{\sqrt{[1 - \exp(-2k'_w l)]^2 + 4 \exp(-2k'_w l) \sin^2(2\chi_{0w})}}, \quad (45)$$

которые при вещественном потенциале тоже вещественны, но $\{\tau_w\}$ может иметь отрицательный знак. При этом $\{\rho_w\}^2 + \{\tau_w\}^2 = 1$, а $\rho_w^2 - \tau_w^2 = \exp(2i\chi_w)$.

При достаточно широком барьере величина $\exp(-2k'_w l)$ мала и фаза χ_w мало отличается от $2\chi_{0w}$ почти во всем диапазоне $0 \leq k \leq \sqrt{W}$. Однако при $k = \sqrt{W}$ она отличается от нуля:

$$\lim_{k \rightarrow \sqrt{W}} \chi_w(k) = \chi_w(\sqrt{W}) = -\arctan(2/l\sqrt{W}). \quad (46)$$

Подстановка (43) и (44) в (41) дает

$$\rho(k) = \frac{\rho_w + [\rho_w^2 - \tau_w^2]e^{2ikd}}{1 + \rho_w \exp(2ikd)} = e^{2ikd+2i\chi_w} \frac{1 + \{\rho_w\}e^{-2ikd-i\chi_w}}{1 + \{\rho_w\}e^{2ikd+i\chi_w}} = e^{2i\chi_\rho}, \quad (47)$$

где

$$\chi_\rho = kd + \chi_w - \arctan \left(\frac{\{\rho_w\} \sin(2kd + \chi_w)}{1 + \{\rho_w\} \cos(2kd + \chi_w)} \right). \quad (48)$$

Соответственно, фаза матрицы рассеяния $S = \exp(2i\delta)$ равна

$$\delta = \chi_\rho - kr_1 + \pi/2 = \pi/2 + \chi_w - kl - \arctan \left(\frac{\{\rho_w\} \sin(2kd + \chi_w)}{1 + \{\rho_w\} \cos(2kd + \chi_w)} \right). \quad (49)$$

При $k=0$ имеем $\{\rho_w(0)\} = 1$, аргумент арктангенса равен $\tan(\chi_w(0)/2)$, поэтому $\delta(0) = \pi/2 + \chi_w(0)/2 = 0$. При $k^2 = W$ имеем

$$\{\rho_w\} = \sqrt{Wl^2/(Wl^2 + 4)} \leq 1,$$

и при $l\sqrt{W} > \pi$ величина $\delta(\sqrt{W})$ отрицательна. В качестве примера на рис. 9 представлены фаза $\delta(k)$ и $\sin(\delta(k))$ для случая $l\sqrt{W} = 5$. Из рис. 9,а видно, что фаза δ с ростом k , осциллируя, убывает от 0 до $\delta(\sqrt{W}) < 0$, причем на монотонное уменьшение фазы накладываются резкие скачки с амплитудой π , обусловленные изменением $2kd$ в последнем слагаемом выражения (49). Эти скачки, характеризующие резонансы, приводят, как показано на рис. 9,б, к резкому изменению формы амплитуды рассеяния, пропорциональной $\sin(\delta(k))$.

Согласно (47) амплитуду отражения $\rho(k)$ вблизи резонансных значений энергии можно представить в виде

$$\rho(k) = -e^{2ikd+2i\chi_w} \frac{1 - \{\rho_w\}[1 - 2i\phi'(k_n)(E - E_n)]}{1 - \{\rho_w\}[1 + 2i\phi'(k_n)(E - E_n)]}, \quad (50)$$

где $E = k^2$ — энергия нейтрона, E_n — положение резонанса и введены обозначения $\phi(k) = \chi_w + 2kd$ и $\phi'(k_n) = d\phi(k)/dE|_{k=k_n}$. Положение резонанса определяется минимумом знаменателя в выражении (47), который достигается при $\phi(k) = \chi_w + 2kd = (2n - 1)\pi$ и целом $n \geq 0$. Таким образом, $E_n = k_n^2$ и k_n находится из решения уравнения $\phi(k_n) = (2n - 1)\pi$.

Выражение (50) можно представить также в виде

$$\rho(k) = e^{2ikd+2i\chi_w} \frac{E - E_n - i\Gamma/2}{E - E_n + i\Gamma/2}, \quad \Gamma = \frac{1 - \{\rho_w\}}{\phi'(k_n)\{\rho_w\}}, \quad (51)$$

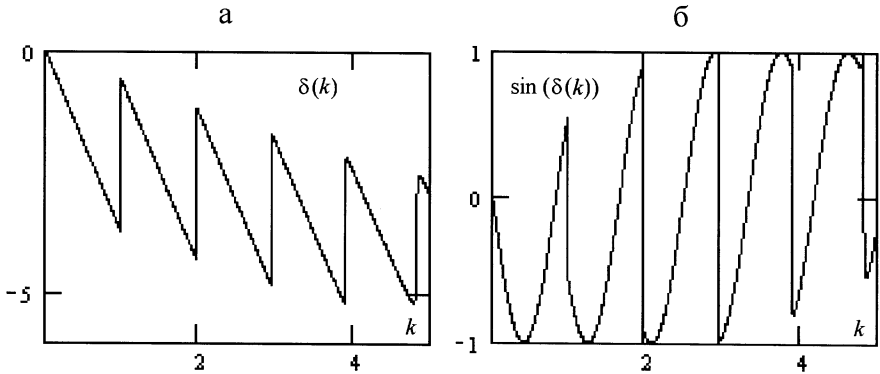


Рис. 9. а) Фаза $\delta(k)$ матрицы рассеяния и б) $\sin(\delta(k))$ для подбарьерного отражения от потенциала, изображенного на рис. 8, при $W = 25$, $l = 1$ и $d = 3$

который хорошо описывает амплитуду $\rho(k)$ вблизи резонансных точек $E = E_n$, когда величина $\{\rho_w\}$ близка к единице. Последняя же при достаточно широком барьере, согласно (44), действительно близка к единице в большей части интервала $0 \leq k \leq \sqrt{W}$ из-за малости $\exp(-2k'_w l)$.

Подстановка (51) в выражение (32) для амплитуды приводит ее к виду $f = e^{i\delta} \sin(\delta)/k =$

$$= -e^{-ikl+i\chi_w} \frac{1}{ik} \frac{(E - E_n) \cos(\chi_w - kl) - (\Gamma/2) \sin(\chi_w - kl)}{E - E_n + i\Gamma/2}. \quad (52)$$

В качестве примера на рис. 10 приведен фрагмент сечения рассеяния

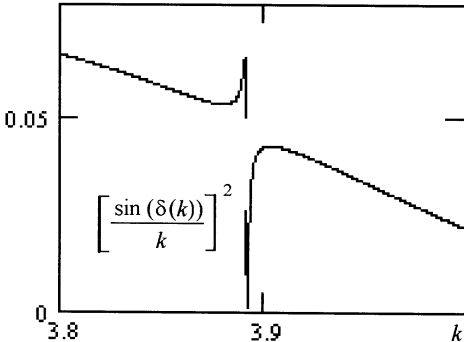


Рис. 10. Резонанс при $k \approx 3,9$ в подбарьерном сечении рассеяния на потенциальном барьере (см. рис. 8)

в зависимости от k вблизи одного из резонансов, рассчитанный для барьера с параметрами $W = 25$, $l = 1$ и $d = 3$.

2.2.2. Надбарьерное отражение

Рассмотрим теперь случай $k^2 > W$. В этом случае выражения для ρ_w , τ_w можно привести к виду $\rho_w = -i\{\rho_w\}e^{i\chi_w}$, $\tau_w = \{\tau_w\}e^{i\chi_w}$, где

$$\chi_w = k_w l + \arctan \left(\frac{\rho_{0w}^2 \sin(2k_w l)}{1 - \rho_{0w}^2 \cos(2k_w l)} \right), \quad (53)$$

$$\begin{aligned} \{\rho_w\} &= \frac{2\rho_{0w} \sin(k_w l)}{\sqrt{(1 - \rho_{0w}^2)^2 + 4\rho_{0w}^2 \sin^2(k_w l)}}, \\ \{\tau_w\} &= \frac{1 - \rho_{0w}^2}{\sqrt{(1 - \rho_{0w}^2)^2 + 4\rho_{0w}^2 \sin^2(k_w l)}} \end{aligned} \quad (54)$$

при вещественном потенциале тоже вещественны, но $\{\rho_w\}$ может иметь отрицательный знак. При этом $\{\rho_w\}^2 + \{\tau_w\}^2 = 1$, а $\rho_w^2 - \tau_w^2 = -\exp(2i\chi_w)$.

Подстановка (53, 54) в (41) приводит последнее выражение к виду

$$\rho(k) = -e^{2ikd + 2i\chi_w} \frac{1 + i\{\rho_w\} \exp(-2ikd - i\chi_w)}{1 - i\{\rho_w\} \exp(2ikd + i\chi_w)} = -e^{2i\chi_\rho}, \quad (55)$$

где

$$\chi_\rho = kd + \chi_w + \arctan \left(\frac{\{\rho_w\} \cos(2kd + \chi_w)}{1 + \{\rho_w\} \sin(2kd + \chi_w)} \right). \quad (56)$$

Соответственно, фаза матрицы рассеяния $S = \exp(2i\delta)$ равна

$$\begin{aligned} \delta &= (k_w - k)l + \arctan \left(\frac{\rho_{0w}^2 \sin(2k_w l)}{1 - \rho_{0w}^2 \cos(2k_w l)} \right) + \\ &+ \arctan \left(\frac{\{\rho_w\} \cos(2kd + \chi_w)}{1 + \{\rho_w\} \sin(2kd + \chi_w)} \right). \end{aligned} \quad (57)$$

Зависимости $\delta(k)$ и $\sin(\delta(k))$ от k представлены на рис. 11, а и 11, б.

При k^2 вблизи W имеем $k_w \approx 0$, $\rho_{0w} \approx 1$ и $\{\rho_w\} \approx kl/\sqrt{4 + k^2 l^2} \leq 1$. При этом, учитывая (46) и соотношение $\pi/2 - \arctan(x) = \arctan(1/x)$, видим, что фаза $\delta(k)$ непрерывна в точке $k = \sqrt{W}$. С ростом k величина ρ_{0w} , а вместе с ней и $\{\rho_w\}$ уменьшаются. Поэтому с ростом k фаза $\delta(k)$ стремится к нулю и амплитуда колебаний вокруг монотонной линии $[k_w(k) - k]l$, обусловленная двумя арктангенсами в (57), тоже стремится к нулю. Таким образом, и в этом случае утверждение [19] о наличии бесконечного числа резонансов тоже несправедливо.

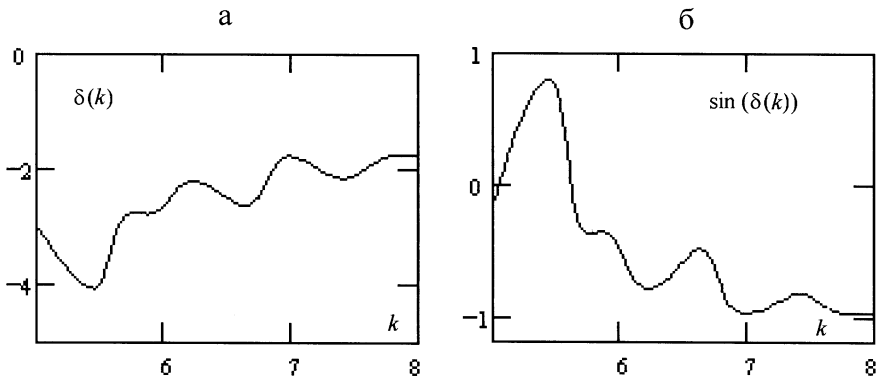


Рис. 11. а) Фаза $\delta(k)$ матрицы рассеяния и б) $\sin(\delta(k))$ при энергии падающего нейтрона выше потенциального барьера, высота которого $W = 25$, ширина $l = 1$, а радиус внутренней части $d = 3$. Видно, что после небольшого уменьшения, не превышающего $\pi/2$, фаза с неглубокими осцилляциями стремится к нулю

2.3. Комбинированный потенциал ямы и барьера

Рассмотрим потенциал, показанный на рис. 12, представляющий собой потенциальную яму, окруженную потенциальным барьером. Глубина ямы радиуса d по-прежнему равна V , а высота барьера шириной l равна W . Число связанных состояний не меняется от присутствия барьера, а на положение уровней барьер оказывает малое влияние. Поэтому мы будем исследовать только фазу δ матрицы рассеяния $S \equiv \exp(2i\delta) = -\rho \exp(-2ikr_1)$.

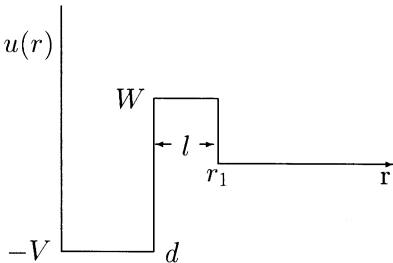


Рис. 12. Сферически-симметричный потенциал на полуоси $r \geq 0$, содержащий потенциальную яму глубиной V и шириной d и потенциальный барьер высотой W и шириной $l = r_1 - d$. Ограничение полуосью можно снять, введя бесконечный потенциал для точки $r = 0$. Амплитуда отражения от бесконечного потенциала равна -1

Амплитуда отражения от точки $r = r_1 = d + l$ равна

$$\rho = \left(\rho_w + \frac{\tau_w^2 \rho_v}{1 - \rho_w \rho_v} \right) = \frac{\rho_w + [\tau_w^2 - \rho_w^2] \rho_v}{1 - \rho_w \rho_v}, \quad (58)$$

где ρ_w, τ_w — амплитуды отражения и пропускания, представляемые выражениями (42), а амплитуда ρ_v дается выражением (37).

Рассмотрим теперь, как ведет себя фаза рассеяния в случае подбарьерного и надбарьерного рассеяния.

2.3.1. Подбарьерное рассеяние

Для подбарьерного рассеяния $k^2 < W$ мы можем воспользоваться представлениями (43) и (45) для ρ_w и τ_w и выражениями (37, 38) для ρ_v . Тогда

$$\rho = \frac{1 + \exp(-i\chi_w - 2i\chi_v)\{\rho_w\}}{1 + \exp(i\chi_w + 2i\chi_v)\{\rho_w\}} \exp(2i\chi_v + 2i\chi_w) = \exp(2i\chi_\rho), \quad (59)$$

где

$$\chi_\rho = \chi_w + \chi_v - \arctan \left(\frac{\sin(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}}{1 + \cos(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}} \right). \quad (60)$$

Соответственно, фаза рассеяния $\delta = \chi_\rho - kr_1 + \pi/2$ равна

$$\delta = \chi_w + \chi_v - \arctan \left(\frac{\sin(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}}{1 + \cos(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}} \right) - k(l + d) + \frac{\pi}{2}.$$

При $k = 0$ имеем $\{\rho_w\} = 1$, $\chi_w = -\pi$ и выражение для фазы приобретает вид

$$\delta = \frac{\pi}{2} + \chi_w + \chi_v - \arctan[\tan(\chi_w/2 + \chi_v)].$$

Поскольку при $k = 0$ фаза $\chi_v = (2N - 1)\pi/2 + \alpha$, где $0 \leq \alpha \leq \pi$, то

$$\arctan[\tan(\chi_w/2 + \chi_v)] = \arctan[\tan(\alpha)] = \begin{cases} \alpha & \text{при } \alpha < \pi/2, \\ \alpha - \pi & \text{при } \pi/2 < \alpha < \pi. \end{cases}$$

Соответственно,

$$\delta(0) = \begin{cases} (N - 1)\pi & \text{при } \alpha < \pi/2, \\ N\pi & \text{при } \pi/2 < \alpha < \pi. \end{cases}$$

Анализ полного выражения для фазы рассеяния

$$\begin{aligned} \delta = & \frac{\pi}{2} + (k_v - k)d + 2\chi_{0w} - kl + \arctan \left(\frac{\exp(-2k'_w l) \sin(4\chi_{0w})}{1 - \exp(-2k'_w l) \cos(4\chi_{0w})} \right) + \\ & + \arctan \left(\frac{\rho_{0v} \sin(2k_v d)}{1 - \rho_{0v} \cos(2k_v d)} \right) - \arctan \left(\frac{\sin(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}}{1 + \cos(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}} \right) \quad (61) \end{aligned}$$

показывает, что с ростом k на монотонное убывание фазы накладываются небольшие колебания за счет первых двух арктангенсов и резкие скачки величины π за счет последнего арктангенса. Поскольку $V \gg W$, то при изменении k от 0 до \sqrt{W} фаза χ_v почти не меняется, и потому все скачки определяются изменением фазы $\chi_w \approx 2\chi_{0w}$. Поскольку она меняется от $-\pi$ до ≈ 0 , то можно ожидать только два скачка в подбарьерном рассеянии. Это подтверждается рис. 13, где приведены графики функции $\delta(k)$ и $\sin(\delta(k))$.

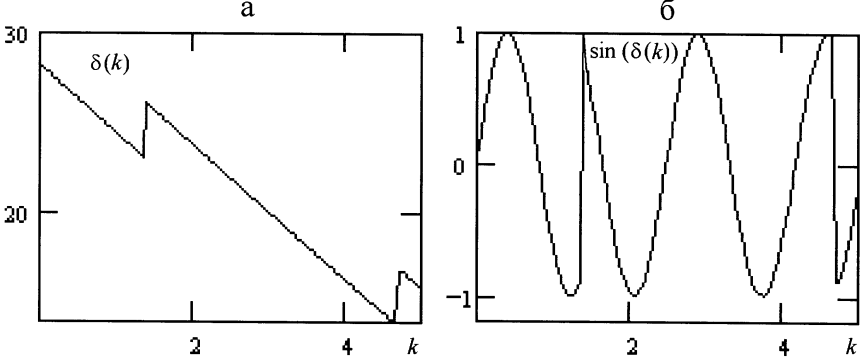


Рис. 13. а) Фаза $\delta(k)$ матрицы рассеяния и б) $\sin(\delta(k))$ для подбарьерного рассеяния на потенциале, показанном на рис. 12, при $V = 100$, $d = 3$, $W = 25$ и $l = 1$

2.3.2. Надбарьерное рассеяние

Для $k^2 > W$ имеем

$$\rho = -\frac{1 + i \exp(-i\chi_w - 2i\chi_v)\{\rho_w\}}{1 - i \exp(i\chi_w + 2i\chi_v)\{\rho_w\}} \exp(2i\chi_v + 2i\chi_w) = -\exp(2i\chi_\rho), \quad (62)$$

где

$$\chi_\rho = \chi_w + \chi_v + \arctan\left(\frac{\cos(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}}{1 + \sin(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}}\right), \quad (63)$$

а $\{\rho_w\}$, χ_w , χ_v определены в (54), (53) и (38) соответственно. Таким образом, фаза матрицы рассеяния равна

$$\delta = \chi_w + \chi_v + \arctan\left(\frac{\cos(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}}{1 + \sin(\chi_w + 2\chi_v)\{\rho_w\}}\right) - kr_1. \quad (64)$$

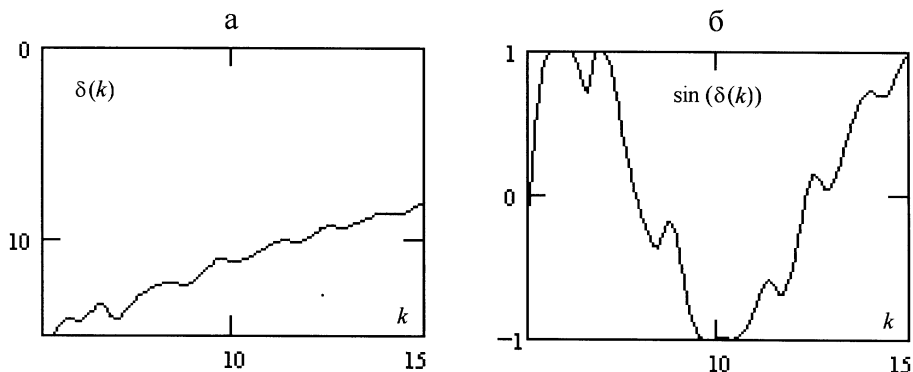


Рис. 14. а) Фаза рассеяния δ и б) функция $\sin(\delta(k))$ в интервале k от 5 до 15 для комбинированного потенциала, показанного на рис. 12. Видно, что число резонансов конечно. При больших значениях k фаза стремится к нулю, как показано на рис. 15

2.4. Резюме

Вышеприведенные исследования, конечно же, далеки от описания реальных систем. Однако они показывают, что построение потенциала, приводящего к резонансам при нужных значениях энергии, возможно, не такая уж безнадежная задача. Одно условие для возникновения узких резонансов должно быть выполнено непременно, а именно помимо потенциальной ямы ядерный потенциал должен обязательно содержать и барьер. Кроме того, потенциал должен кроме узкой глубокой ямы содержать также и более протяженную область с неглубоким потенциалом.

Выше, кроме того, было показано, что число резонансов всегда конечно. Это противоречит противоположному утверждению монографии [19]. Более того, число резонансов равно числу связанных состояний в системе. К числу резонансов следует также отнести широкие максимумы, известные как гигантские дипольные резонансы. Они отвечают надбарьерному рассеянию.

Мы рассмотрели только простейшие случаи прямоугольных потенциалов. В таких потенциалах расстояние между резонансами, вообще говоря, увеличивается с ростом энергии, что не соответствует распределению резонансов в реальных системах. Однако можно надеяться, что при более реалистичном выборе потенциала можно получить систему с правильным распределением резонансов. Простой алгебраич-

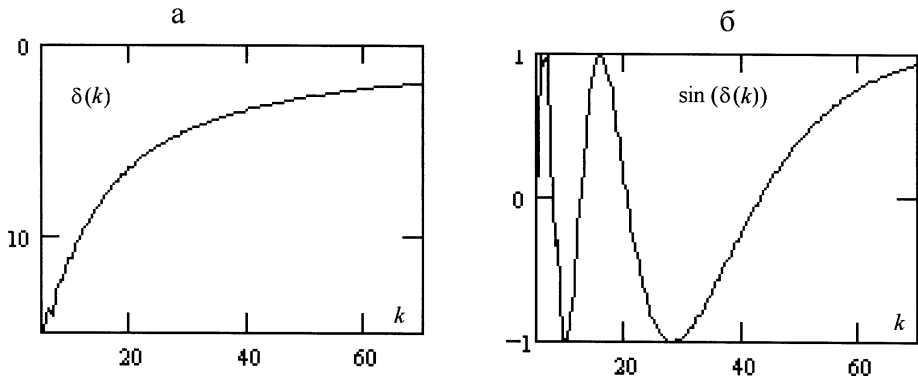


Рис. 15. а) Фаза рассеяния δ и б) функция $\sin(\delta(k))$ в интервале k от 5 до 60 для комбинированного потенциала, показанного на рис. 12. Видно, что при больших k фаза стремится к нулю

ческий подход, использованный здесь, открывает перспективы в этом направлении.

3. Апокриф теории рассеяния

Вся стандартная теория рассеяния основана на представлении волновой функции рассеиваемой частицы (для конкретности будем говорить о нейтроне) в виде

$$\psi = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \frac{b}{r}e^{ikr}, \quad (65)$$

т.е. в ней содержится плоская падающая волна и рассеянная — сферическая. Это не соответствует принципам квантовой механики, согласно которым рассеяние — это переход между собственными состояниями свободной частицы.

Главное утверждение состоит в следующем. Если собственная волновая функция падающего нейтрона представляется плоской волной $\psi_0(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega_0 t)$ ($\omega_0 = k_0^2/2$), то поле $\psi(\mathbf{r}, t)$ после рассеяния в пределе $t \rightarrow \infty$ раскладывается по плоским волнам:

$$\delta\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3p A(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{p}) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} - ip^2 t/2) \quad (66)$$

и рассеяние (переход между двумя свободными состояниями до и после акта взаимодействия) описывается коэффициентами $A(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{p})$, кото-

рые характеризуют вероятность $|A(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{p})|^2$ перехода из состояния плоской волны с волновым вектором \mathbf{k} в состояние плоской же волны с волновым вектором \mathbf{p} . Волновая функция (65), которая вместе с временным множителем имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega_0 t) - \frac{b}{r} e^{ik_0 r - i\omega_0 t}, \quad (67)$$

не годится для описания рассеяния, потому что она определена для конечных времен t в промежутке между двумя пределами $-\infty \ll t \ll +\infty$.

Рассмотрим несколько простых примеров того, как должны вычисляться вероятности рассеяния.

3.1. Упругое рассеяние на отдельном центре

Если имеется один рассеивающий центр, то рассеяние на нем можно описать потенциалом

$$\frac{u(\mathbf{r}, t)}{2} = 2\pi b \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t)).$$

Здесь и далее будут использоваться такие единицы, в которых $\hbar^2/m = 1$, где m — масса нейтрона. Если \mathbf{r}_0 зависит от t , то мы обязаны использовать нестационарное уравнение Шредингера (УШ). Если \mathbf{r}_0 от t не зависит, то мы вправе пользоваться как стационарным, так и нестационарным УШ. Поскольку выше речь шла о предельном переходе $t \rightarrow \infty$, то мы начнем с нестационарного уравнения, после чего покажем, как тот же результат может быть получен и в стационарном подходе.

3.1.1. Нестационарное УШ

Запишем нестационарное УШ

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2} + \frac{u(\mathbf{r}, t)}{2} \right] \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (68)$$

Пользуясь теорией возмущений, представим волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) + \delta\psi(\mathbf{r}, t), \quad (69)$$

где $\psi_0(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega_0 t)$ — решение свободного уравнения (68) без потенциала, описывающее падающую волну, а $\delta\psi(\mathbf{r}, t)$ — рассеянное поле.

Подстановка (69) в (68) приводит к уравнению для $\delta\psi(\mathbf{r}, t)$, решение которого записывается в виде

$$\delta\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' dt' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') 2\pi b \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0(t')) \psi_0(\mathbf{r}', t'), \quad (70)$$

где G — функция Грина нестационарного уравнения, которую можно представить в виде фурье-интеграла:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^3p d\omega}{p^2/2 - \omega - i\epsilon} \exp(i\mathbf{p}[\mathbf{r} - \mathbf{r}'] - i\omega[t - t']). \quad (71)$$

Легко проверить простой подстановкой, что функция G удовлетворяет уравнению

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2} \right] G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (72)$$

Примем, что рассеивающий атом фиксирован в пространстве, т.е. мы имеем дело с чисто упругим рассеянием, и для простоты положим $\mathbf{r}_0(t) = 0$. Подстановка в (70) дает $\delta\psi(\mathbf{r}, t) =$

$$\begin{aligned} &= \frac{2\pi b}{(2\pi)^4} \int \frac{d^3p d\omega d^3r' dt'}{p^2/2 - \omega - i\epsilon} \exp(i\mathbf{p}[\mathbf{r} - \mathbf{r}'] - i\omega[t - t']) \delta(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}' - i\omega_0 t'} = \\ &= \frac{b}{(2\pi)^2} \int \frac{d^3p}{p^2/2 - \omega_0 - i\epsilon} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\omega_0 t). \end{aligned} \quad (73)$$

Мы видим, что рассеянное поле записывается в виде суперпозиции плоских волн:

$$\delta\psi = \int f(\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\omega_0 t) d^3p, \quad f(\mathbf{p}) = \frac{b}{(2\pi)^2(p^2/2 - \omega_0 - i\epsilon)}, \quad (74)$$

но эти волны не представляют нейтрон, поскольку $\omega_0 = k_0^2/2 \neq p^2/2$. Для описания нейтрона требуются волны $\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\omega_p t)$, в которых $\omega_p = p^2/2$. Покажем, что (73) в пределе $t \rightarrow \infty$ переходит в суперпозицию именно нейтронных волн. Для этого перепишем (73) в виде

$$\delta\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{b}{r} e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega_0 t} = \int \frac{b}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i[\omega_p - \omega_0]t)}{\omega_p - \omega_0 - i\epsilon} d^3p \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\omega_p t), \quad (75)$$

где $\omega_p = p^2/2$. Это выражение содержит нейтронную волну с амплитудой

$$F(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{p}, t) = \frac{b}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i[\omega_p - \omega_0]t)}{\omega_p - \omega_0 - i\epsilon}, \quad (76)$$

которая зависит от времени. Амплитуду можно переписать в виде

$$F(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{p}, t) = i \frac{b}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^t dt' \exp(i[\omega_p - \omega_0]t'), \quad (77)$$

из которого следует, что в пределе $t \rightarrow \infty$ она переходит в

$$F(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{p}) = \lim_{t \rightarrow \infty} F(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{p}, t) = i \frac{b}{2\pi} \delta(\omega_p - \omega_0). \quad (78)$$

Подставив (78) в (75), получим

$$\delta\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{ib}{2\pi} \delta(\omega_p - \omega_0) d^3p \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r} - i\omega_p t) = \int \frac{ibk_0}{2\pi} d\Omega \exp(i\mathbf{k}_\Omega \mathbf{r} - i\omega_0 t), \quad (79)$$

где $d\Omega$ обозначает интервал телесного угла, а \mathbf{k}_Ω — волновой вектор в направлении Ω , длина которого равна k_0 . Из (79) следует, что рассеяние в направлении \mathbf{k}_Ω в интервал телесного угла $d\Omega$ описывается безразмерной величиной

$$A(\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_\Omega) = i \frac{k_0 b}{2\pi} = i \frac{b}{\lambda}, \quad (80)$$

где $\lambda = 2\pi/k_0$. Соответственно, вероятность рассеяния в интервал $d\Omega$ равна $|b/\lambda|^2 d\Omega$. Полная же вероятность рассеяния во все углы равна

$$W = \frac{4\pi|b|^2}{\lambda^2} = \frac{1}{\pi} k_0^2 b^2. \quad (81)$$

Мы получили этот результат с помощью нестационарного уравнения Шредингера, в котором можно четко определить предельный переход к $t \rightarrow \infty$, но он может быть получен и в стационарной картине.

3.1.2. Стационарное УШ

Предельный переход $t \rightarrow \infty$ означает, что частица ушла из области взаимодействия с рассеивателем, т.е. она находится вдали от рассеивающего центра. Но описание вдали от рассеивающего центра можно

получить и с помощью стационарной волновой функции (65). Действительно, воспользуемся фурье-представлением сферической функции

$$\frac{\exp(ikr)}{r} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})}{p^2 - k_0^2 - i\epsilon}. \quad (82)$$

Рассмотрим точку \mathbf{r} вдали от рассеивающего центра. В интеграле (82) можно произвести интегрирование по одной из трех компонент \mathbf{p} . Удобно выбрать компоненту $\mathbf{p}_r \parallel \mathbf{r}$. В результате получим

$$\frac{\exp(ikr)}{r} = \frac{i}{2\pi} \int \frac{d^2p_\perp \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})}{p_r}, \quad (83)$$

где p_r обозначает величину $p_r = \sqrt{k^2 - p_\perp^2}$, а вектор \mathbf{p} в экспоненте можно представить как $\mathbf{p} = \mathbf{p}_\perp + p_r \mathbf{r}/r$, причем вектор \mathbf{p}_\perp перпендикулярен к \mathbf{r} . Интегрирование по p_\perp происходит в бесконечных пределах. Однако при $|\mathbf{p}_\perp| > k$ величина \mathbf{p}_r становится мнимой и волна $\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) = \exp(ip_r r)$ оказывается экспоненциально затухающей. При больших r экспоненциально затухающими волнами можно пренебречь. Это означает, что в интеграле (83) можно ограничиться только областью интегрирования $p_\perp < k$. Но для этой области справедливо соотношение

$$\frac{d^2p_\perp}{p_r} = 2d^3p \delta(p^2 - k^2). \quad (84)$$

Подставив (84) в (83) и (65), получим, что для больших r , т.е. вдали от рассеивающего центра, функцию (65) можно представить в виде суперпозиции:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{ib}{2\pi} \int 2d^3p \delta(p^2 - k^2) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{ibk}{2\pi} \int d\Omega e^{i\mathbf{k}_\Omega \mathbf{r}}, \quad (85)$$

что согласуется с ранее полученным результатом.

3.2. Рассеяние на движущемся атоме

Для определения вероятности рассеяния в этом случае можно перейти в систему центра масс и использовать стационарное УШ, но мы воспользуемся нестационарным уравнением

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta_1}{2} + \frac{\mu \Delta_2}{2} + \frac{u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t)}{2} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 0, \quad (86)$$

где $u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 4\pi b\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, $\mu = m/M$ и координата \mathbf{r}_1 относится к нейтрону, а \mathbf{r}_2 — к атомному ядру. Рассеянием на электронах атома будем пренебрегать.

Решение уравнения будем искать по теории возмущения в виде

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + \delta\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t), \quad (87)$$

где $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ удовлетворяет уравнению (86) без взаимодействия и представляет собой начальную волновую функцию до рассеяния, а поправка $\delta\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ представляется в виде интеграла

$$\delta\psi = \int G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2, t - t') \frac{u(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2, t')}{2} \psi_0(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, t') d^3r'_1 d^3r'_2 dt', \quad (88)$$

который содержит функцию Грина $G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2, t - t') =$

$$= \int \frac{\exp(i\mathbf{p}_1[\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1] + \mathbf{p}_2[\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2] - i\omega[t - t']) d^3p_1 d^3p_2 d\omega}{p_1^2/2 + \mu p_2^2/2 - \omega - i\epsilon} \frac{d^3p_1 d^3p_2 d\omega}{(2\pi)^7}. \quad (89)$$

За начальное состояние примем произведение плоских волн нейтрона и атома:

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 - i\omega_{01}t) \exp(i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_2 - i\omega_{02}t), \quad (90)$$

где $\omega_{10} = k_1^2/2$, а $\omega_{20} = \mu k_2^2/2$. Подставив (90) и (89) в (87), получим

$$\begin{aligned} \delta\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \frac{2\pi b}{(2\pi)^7} \int \frac{d^3p_1 d^3p_2 d\omega d^3r'_1 d^3r'_2 dt'}{p_1^2/2 + \mu p_2^2/2 - \omega - i\epsilon} e^{i\mathbf{p}_1[\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1] + i\mathbf{p}_2[\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2] - i\omega[t - t']} \times \\ &\quad \times \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r}'_1 + i\mathbf{k}_2\mathbf{r}'_2 - i[\omega_{10} + \omega_{20}]t') = \\ &= \frac{b}{(2\pi)^2} \int \frac{d^3p_1 d^3p_2 \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}{p_1^2/2 + \mu p_2^2/2 - \omega_{10} - \omega_{20} - i\epsilon} e^{i\mathbf{p}_1\mathbf{r}_1 + i\mathbf{p}_2\mathbf{r}_2 - i[\omega_{10} + \omega_{20}]t}. \end{aligned} \quad (91)$$

Последнее выражение можно представить в виде суперпозиции плоских волн нейтрона и атома:

$$\delta\psi = \int F(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t) d^3p_1 d^3p_2 \exp(i\mathbf{p}_1\mathbf{r}_1 - ip_1^2 t/2) \exp(i\mathbf{p}_2\mathbf{r}_2 - ip_2^2 t/2), \quad (92)$$

если ввести зависящую от времени амплитуду $F(\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{p}_1, \mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{p}_2, t) =$

$$= \frac{b}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i[\omega_1 + \omega_2 - \omega_{10} - \omega_{20}]t)}{\omega_1 + \omega_2 - \omega_{10} - \omega_{20} - i\epsilon} \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \quad (93)$$

где $\omega_1 = p_1^2/2$, $\omega_2 = \mu p_2^2/2$. Выражение (93) эквивалентно

$$\frac{ib}{(2\pi)^2} \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \int_{-\infty}^t \exp(i[\omega_1 + \omega_2 - \omega_{10} - \omega_{20}]t'),$$

и в пределе $t \rightarrow \infty$ оно переходит в

$$F(\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{p}_1, \mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{p}_2) = \frac{ib}{2\pi} \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_{10} - \omega_{20}), \quad (94)$$

что соответствует законам сохранения энергии и импульса.

Подставив (94) в (92) и далее в (88), получим

$$\delta\psi = \frac{ib}{2\pi} \int \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_{10} - \omega_{20}) d^3 p_1 e^{i\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 - ip_1^2 t/2} e^{i\mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2 - ip_2^2 t/2}, \quad (95)$$

где $\mathbf{p}_2 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{p}_1$.

Аргумент δ -функции можно представить в виде

$$2(\omega_1 + \omega_2 - \omega_{10} - \omega_{20}) = (1 + \mu) \left(\mathbf{p}_1 - \frac{\mu}{1 + \mu} \mathbf{P} \right)^2 - \frac{(\mathbf{k}_1 - \mu \mathbf{k}_2)^2}{1 + \mu}, \quad (96)$$

где введен полный импульс $\mathbf{P} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$. Переходя от переменной \mathbf{p}_1 к переменной $\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 - \mu \mathbf{P}/(1 + \mu)$, что эквивалентно переходу в систему центра масс, и интегрируя по q , преобразуем выражение (95) к виду

$$\delta\psi = \frac{ibq}{2\pi(1 + \mu)^2} \int d\Omega_q \exp \left(i\mathbf{q}_\Omega \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{1 + \mu} + i \frac{\mu \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{1 + \mu} \mathbf{P} - i \frac{k_1^2 + \mu k_2^2}{2} t \right), \quad (97)$$

где $q = |k_1 - \mu k_2|$, а \mathbf{q}_Ω — вектор длиной q , указывающий в направлении Ω .

Таким образом, вероятность рассеяться в направлении Ω_q в интервал $d\Omega_q$ в системе центра масс равна

$$dW(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}_\Omega) = \left| \frac{bq}{2\pi(1 + \mu)^2} \right|^2 d\Omega_q. \quad (98)$$

Это выражение можно преобразовать обратно к лабораторной системе. Для этого нужно только произвести замену

$$\frac{q d\Omega_q}{(1 + \mu)^2} = 2d^3 q \delta \left((1 + \mu) \mathbf{q} - \frac{(k_1 - \mu k_2)^2}{1 + \mu} \right) = d^3 p_1 \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_{10} - \omega_{20}),$$

откуда легко получаем дважды дифференциальную вероятность рассеяния $d^2 W/d\omega_1 d\Omega_1$ при заданных значениях начальных импульсов \mathbf{k}_1

и k_2 нейтрона и атома соответственно. Если же мы хотим вычислить рассеяние в газе при заданной температуре, то мы должны полученную вероятность усреднить по максвелловскому распределению $M(k_2^2/T)$ начальных импульсов атома. Соответствующие расчеты для полной вероятности рассеяния нейтрона были проведены для одноатомного газа ${}^4\text{He}$ и представлены в работе [22]. Результаты отличаются от стандартных и требуют экспериментальной проверки.

3.3. Неупругое рассеяние на произвольной системе

Изложенный выше подход к рассеянию на подвижном атоме может быть использован и для расчета рассеяния нейтрона на произвольной системе.

Рассмотрим взаимодействие нейтрона с произвольной системой, которая может совершать квантовые переходы. Для вычисления вероятности рассеяния необходимо решить УШ для обоих участников процесса: нейтрона и системы. Соответствующее уравнение имеет вид

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2} - H_2 + \frac{u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t)}{2} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 0, \quad (99)$$

где $u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 4\pi b\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, координата \mathbf{r}_1 относится к нейтрону, \mathbf{r}_2 — к рассматриваемой системе, а H_2 — гамильтониан системы, который для простоты мы будем считать имеющим дискретный спектр. Решение этого уравнения опять будем искать по теории возмущений в виде (87), где начальное решение свободного уравнения (99) без потенциала взаимодействия есть

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \Phi_n(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_1 - i[E_p + E_n]t), \quad (100)$$

а $\Phi_n(\mathbf{r})$ и E_n — собственная функция и собственное значение гамильтониана H_2 . Собственная функция для нейтрона представляется по-прежнему плоской волной, и начальная энергия нейтрона равна $E_p = p^2/2$.

Подстановка (87) в (99) приводит к уравнению для $\delta\psi$, решение которого приводится к виду (88) с функцией Грина

$$\begin{aligned} & G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2, t - t') = \\ & = \sum_n \int \frac{\exp(i\mathbf{p}[\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1] - i\omega[t - t']) \Phi_n(\mathbf{r}_2) \Phi_n^*(\mathbf{r}'_2) d^3 p d\omega}{E_p + E_n - \omega - i\epsilon} \frac{d^3 p d\omega}{(2\pi)^4}. \end{aligned} \quad (101)$$

Подстановка (101) и (100) в (88) приводит к

$$\begin{aligned} \delta\psi &= \frac{2\pi b}{(2\pi)^4} \sum_n \int \frac{d^3 p d\omega d^3 r'_1 d^3 r'_2 dt'}{E_p + E_n - \omega - i\epsilon} e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) - i\omega(t-t')} \Phi_n(\mathbf{r}_2) \Phi_n^*(\mathbf{r}'_2) \times \\ &\quad \times \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \Phi_{n_0}(\mathbf{r}'_2) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}'_1 - i[E_k + E_{n_0}]t') = \\ &= \frac{b}{(2\pi)^2} \sum_n \int \frac{d^3 p M_{n,n_0}(\mathbf{k} - \mathbf{p})}{E_p + E_n - E_k - E_{n_0} - i\epsilon} \Phi_n(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_1 - i[E_k + E_{n_0}]t), \end{aligned} \quad (102)$$

где

$$M_{n,n_0}(\mathbf{q}) = \int d^3 r \Phi_{n_0}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}) \quad (103)$$

— матричный элемент перехода.

Выражение (102) представляет собой суперпозицию произведения свободных волновых функций системы и нейтрона:

$$\delta\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \sum_n \int d^3 p F(n, \mathbf{p}, t) \Phi_n(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_1 - i[E_p + E_n]t) \quad (104)$$

с амплитудой

$$F(n, \mathbf{p}, t) = \frac{b}{(2\pi)^2} M_{n,n_0}(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \frac{\exp(i[E_p + E_n - E_k - E_{n_0}]t)}{E_p + E_n - E_k - E_{n_0} - i\epsilon}, \quad (105)$$

которую можно представить в виде

$$F(n, \mathbf{p}, t) = \frac{ib}{(2\pi)^2} M_{n,n_0}(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \int_{-\infty}^t dt' \exp(i[E_p + E_n - E_k - E_{n_0}]t'). \quad (106)$$

Выражение (106) имеет предел

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F(n, \mathbf{p}, t) = F_{n_0 \rightarrow n}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}) = \frac{ib}{2\pi} M_{n,n_0}(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \delta(E_p + E_n - E_k - E_{n_0}), \quad (107)$$

соответствующий закону сохранения энергии.

Подстановка (107) в (104) приводит к

$$\delta\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \sum_n \int d\Omega_p \frac{ibp}{2\pi} M_{n,n_0}(\mathbf{k} - \mathbf{p}_\Omega) \Phi_n(\mathbf{r}_2) \exp(i\mathbf{p}_\Omega \mathbf{r}_1 - i[E_p + E_n]t), \quad (108)$$

где $E_p = E_k + E_{n_0} - E_n$, $p = \sqrt{2E_p}$ и \mathbf{p}_Ω — вектор длиной p , указывающий в направлении Ω .

Таким образом, вероятность рассеяться под углом Ω равна

$$dW(n_0 \rightarrow n, \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}_\Omega) = \left| \frac{bp}{2\pi} M_{n,n_0}(\mathbf{k} - \mathbf{p}_\Omega) \right|^2 d\Omega_p, \quad (109)$$

а дважды дифференциальная вероятность равна

$$\frac{d^2}{dE_p d\Omega} W(n_0 \rightarrow n, \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}) = p \left| \frac{b}{2\pi} M_{n,n_0}(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \right|^2 \delta(E_p + E_n - E_k - E_{n_0}). \quad (110)$$

Если состояния системы нас не интересуют, то нужно просуммировать (110) по всем n и усреднить по n_0 .

3.4. “Дефект” безразмерных вероятностей

Полученные амплитуды вероятностей являются матричными элементами матрицы рассеяния S , описывающей переходы между свободными состояниями². Их главная особенность заключается в том, что они безразмерны и приводят к безразмерным же полным вероятностям рассеяния.

Введение безразмерных вероятностей для описания экспериментальных данных обнажает одно интересное обстоятельство. Оказывается, что с безразмерными вероятностями возникает трудность при описании пропускания нейтронов через образец. В стандартной теории пропускание образца описывается экспоненциальной функцией

$$T = \exp(-N_0\sigma L),$$

где L — толщина образца, N_0 — плотность атомов, а σ — полное сечение рассеяния. При этом комбинация $N_0\sigma L$ безразмерна. Если мы заменим сечение σ , имеющее размерность площади, на безразмерную величину W , то комбинация N_0WL становится размерной, ее величина зависит от выбора единицы длины, и величина $\exp(-N_0WL)$ оказывается неопределенной. Мы вынуждены вводить дополнительный параметр, обозначим его A , с размерностью площади. Однако при этом необходимо выяснить физический смысл этого параметра.

Если нейтрон — плоская волна, то ослабление нейтронного потока определяется полным количеством рассеивателей на пути волны. Полное количество рассеивателей в образце равно $N = N_0V$, где $V =$

²Нужно оговориться, что соответствующая матрица рассеяния не совпадает с фазовым множителем $\exp(2id)$ при расходящейся сферической волне.

LA — объем образца, поэтому в качестве A следует принять поперечные размеры образца. Но эксперимент показывает, что пропускание образца не зависит от его поперечных размеров, поэтому поперечные размеры образца не могут быть приняты в качестве параметра A и, значит, нейтрон не может описываться бесконечной плоской волной.

В стандартной теории рассеяния параметром A служит квадрат длины волны нейтрона — λ^2 . Это может быть обосновано только тем, что $W\lambda^2 = 4\pi b^2$ — обычное сечение рассеяния нейтрона. Никаких физических обоснований для этого нет. Кроме того, это приводит к указанному во введении парадоксу, согласно которому сечение рассеяния в некоторых случаях оказывается значительно больше геометрических размеров ядра.

Если нейтрон не бесконечная плоская волна, то он — пакет с ограниченной площадью волнового фронта. В этом случае пропускание через образец определяется количеством рассеивателей $N = N_0V$ внутри объема V , охватываемого пакетом, и в качестве A следует взять поперечные размеры волнового фронта пакета. Возможно, что A пропорционально λ^2 : $A = \alpha\lambda^2$, где α — коэффициент пропорциональности, тогда пропускание T нейтрона образцом толщиной L становится равным

$$T = \exp(-4\pi\alpha|b|^2N_0L), \quad (111)$$

как и в обычном подходе, но полное сечение оказывается равным $4\pi|b'|^2$, где b' перенормированная амплитуда b : $b' = \sqrt{\alpha}b$.

Следует отметить, что волновой пакет не должен расплываться. Если он расплывается, то пропускание образца должно уменьшаться при перемещении его от источника к детектору и увеличиваться при приближении к источнику. Но такого эффекта пока никто не наблюдал.

Известно, что нормированный пакет, удовлетворяющий однородному УШ, в квантовой механике построить нельзя. Ненормируемый же пакет построить можно. Примером тому служит несингулярный волновой пакет де Бройля [23]

$$\psi = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t) \frac{\sin(s|\mathbf{r} - \mathbf{v}t|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{v}t|}, \quad (112)$$

в котором $\omega = k^2/2 + s^2/2$ и $\mathbf{v} = \mathbf{k}$ в единицах $\hbar^2/m = 1$. Пакет (112) представляет собой сферическую функцию Бесселя $j_0(sr) \exp(-is^2t/2)$,

центр которой движется со скоростью \mathbf{v} . Однако, вследствие ненормируемости, фронту пакета (112) нельзя сопоставить конечный поперечный размер A .

Примером нормируемого пакета служит сингулярный волновой пакет де Бройля [23]

$$\psi(s; \mathbf{v}; \mathbf{r}; t) = C \exp(i\mathbf{v}\mathbf{r} - i\omega t) \frac{\exp(-s|\mathbf{r} - \mathbf{v}t|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{v}t|}, \quad (113)$$

где $C = \sqrt{s/2\pi}$ — нормировочная постоянная, определяемая с помощью соотношения

$$\int d^3r |\psi(s, \mathbf{v}, \mathbf{r}, t)|^2 = 1, \quad (114)$$

s — параметр, который характеризует ширину пакета в импульсном и обратную ширину в координатном пространстве, \mathbf{v} — скорость нейтрона и $\omega = (v^2 - s^2)/2$. Величина ω меньше полной энергии нейтрона на $s^2/2$. Можно считать, что эта часть энергии необходима для того, чтобы поддерживать пакет в нерасплывающемся состоянии. Сингулярный пакет представляет собой сферическую функцию Ханкеля $H_0^{(1)}(isr)$ мнимого аргумента, движущуюся со скоростью \mathbf{v} . Поперечное сечение этого пакета можно характеризовать величиной $A_n = \pi/s^2$, и если, например, величина s пропорциональна k , т.е. $s = \xi k = 2\pi\xi/\lambda$, то поперечное сечение нейтрона $A_n = \pi\lambda^2/(2\pi\xi)^2$ пропорционально λ^2 и коэффициент перенормировки амплитуды рассеяния b равен $\sqrt{\alpha} = 1/2\sqrt{\pi}\xi$.

Волновой пакет не является плоской волной, при анализе рассеяния которой мы пришли к противоречию. Поэтому нужно как бы начинать все исследование заново, принимая изначально, что нейтрон не плоская волна, а волновой пакет! Однако волновой пакет может рассеиваться приблизительно так же, как и плоская волна, и потому отличие может носить не принципиальный характер, а относиться только к категории качества приближения.

Тем не менее переход от плоской волны к пакету может потребовать пересмотра интерпретации многих экспериментальных данных, поскольку перенормировка амплитуд рассеяния, о которой было сказано выше, означает, что данные рассеяния содержат в себе информацию не только о рассеивателе, но и о рассеиваемой частице. В частности, необходимо выяснить, зависит ли параметр A_n от λ и если

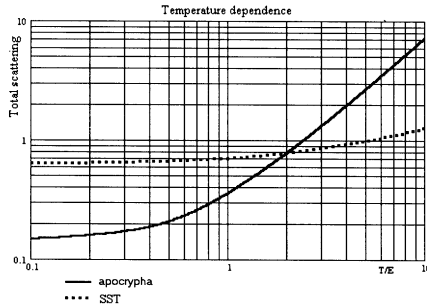


Рис. 16. Зависимость полного сечения рассеяния в гелии-4 ($\mu = m/M = 0,25$) от $\tau = T/E$, рассчитанная согласно стандартной теории и теории, изложенной здесь (аросурфа) в предположении постоянства A_n . Для удобства сравнения две кривые приведены к одинаковому значению при $T/E = 2$

зависит, то как. Исследования с волновым пакетом де Бройля (113) пока очень немногочисленны [24, 25], и некоторые результаты свидетельствуют в пользу того, что A_n не зависит от λ . Поэтому при расчете [22] рассеяния нейтронов на ${}^4\text{He}$ было принято, что $A_n = \text{const}$. На рис. 16 показаны результаты расчета и проводится сравнение с известными результатами [26] стандартной теории. В настоящее время нет экспериментальных данных по рассеянию нейтронов в ${}^4\text{He}$, и, когда эксперименты по полному рассеянию будут проведены, из них можно будет получить информацию относительно зависимости площади поперечного сечения нейтрона A_n от его длины волны.

3.5. Резюме

Мы показали, как естественным образом описывать рассеяние на языке вероятности, а не сечения. Изложенная здесь теория, во-первых, более логична и, во-вторых, содержит принципиальный результат. Она с необходимостью приводит к конечному размеру волновой функции самого нейтрона. В настоящее время ведется поиск физических эффектов, в которых проявляются свойства волнового пакета. В работе [24] делается попытка найти подграничное пропускание зеркал при падении на них нейтронов под углом полного отражения, а в работе [25] исследуются поправки к интерференции нейтронов на тонких слоях вещества. Исследования в указанных областях пока еще далеки от завершения,

и потому мы не будем их здесь обсуждать. Но хотелось бы отметить, что все вышеизложенное является продолжением и развитием тех идей, которые родились в результате бесед с Ю.Останевичем.

Заключение

В данной работе рассмотрены три темы, имеющие непосредственное отношение к работам Ю.Останевича и научным дискуссиям с ним. Эксперименты по химическим сдвигам оказались довольно сложными, и результаты по измерению радиусов при возбуждении ядер после захвата нейтронов содержат довольно большую неопределенность. Хочется надеяться, что более совершенные источники нейтронов позволят получить более прецизионные результаты, и тогда работа, инициированная Ю.Останевичем, продолжится на новом экспериментальном уровне.

Что касается двух других тем, то исследование в них только начинается, и будет правильно, если успехи в них окажутся связанными с именем Ю.Останевича, тогда как за все недочеты, если они будут обнаружены, ответственность ложится целиком и полностью на автора данной статьи, который на свой страх и риск решился вынести результаты своих размышлений и бесед на суд научной общественности без одобрения Ю.Останевича.

Послесловие

В завершение хотелось бы отметить и еще некоторые идеи и парадоксы, которые мы рассматривали с Ю.Останевичем. Я помню, незадолго до его внезапной кончины мы обсуждали парадокс Ольберса. Согласно этому парадоксу светимость неба в однородной бесконечной Вселенной должна быть бесконечна. Действительно, количество энергии, приходящей от звезд, находящихся на расстоянии r , убывает пропорционально $1/r^2$, но число звезд с расстоянием r возрастает пропорционально r^3 , поэтому полная энергия при $r \rightarrow \infty$ становится бесконечной.

— Юра, — говорил я, — представь себе, что фотоны не распространяются, их плотность в пространстве конечна, тогда никакого парадокса нет. Далее, представим себе, что фотоны движутся, но область

их распространения ограничена, тогда мы можем видеть только фотоны из нашего окружения, в котором заперты наши фотоны, и опять никакого парадокса нет.

— Ну, — отвечал он, — в этом плане общая теория относительно-сти лучше твоей, поскольку она сразу ограничивает пространство конечным объемом, а тебе нужно что-то придумывать, чтобы запереть фотоны в ограниченном объеме.

— Конечно, общая теория привлекательна, как сказка, в которую хочется верить, но и мне ничего придумывать не надо. Известна, например, локализация Андерсона. Фотон рассеивается в хаотической среде и оказывается локализован. Таким образом, область локализации и есть та область, в которой заперт фотон.

— В общей теории есть красное смещение, а что есть в твоей?

— У меня тоже есть красное смещение, и причем совершенно естественное. Представь себе линию водорода. Она не бесконечно узкая, она описывается лоренцовским распределением и простирается далеко от центра и в область малых, и в область больших длин волн. Рассеяние более коротких длин волн более интенсивно, значит, длина локализации короче. Поэтому от дальних звезд мы видим только красный хвост той же водородной линии.

— Ну что ж, тогда тебе осталось связать постоянную Хаббла с длиной локализации, — сказал он и пообещал сам над этим подумать. Мы договорились продолжить обсуждение осенью, но продолжение не состоялось.

Был еще один парадокс, который он всем предлагал решить: излучает ли электрон, когда ускоряется в поле тяжести? Если да, то нет принципа эквивалентности и равноускоренную систему можно отличить от гравитации. Если же нет, например, он никогда не излучает, когда движется по геодезической, то возникает вопрос, а излучает ли электрон, лежащий на стуле? Он ведь тогда находится не на геодезической. Решения этого парадокса я не знаю до сих пор.

Приложение. Алгебра одномерного рассеяния

Рассмотрим для простоты одномерный потенциал, составленный из двух потенциальных барьеров, как показано на рис. 17, и найдем для него отражение и пропускание волны, падающей слева. Барьеры

можно разнести на бесконечно малое расстояние ϵ , при этом физический процесс пропускания и отражения не меняется, поскольку пропускание созданной таким образом бесконечно узкой щели равно единице. Однако математика при этом сильно упрощается.

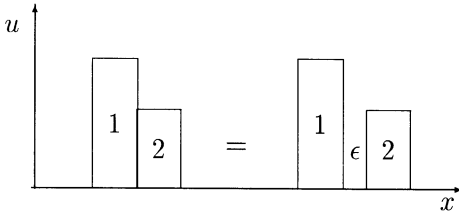


Рис. 17. В потенциале, состоящем из двух барьеров, можно ввести бесконечно узкую щель ϵ между барьерами. Отражение и пропускание системы барьеров выражается через амплитуды отражения и пропускания отдельных барьеров и учитывает многократные отражения в щели

Обозначим амплитуды отражения и пропускания отдельных барьеров через ρ_i, τ_i соответственно, где $i = 1, 2$, а амплитуды отражения и пропускания обоих вместе — через ρ_{12} и τ_{12} . Нейтрон при отражении от всей системы может отразиться сразу от первого, а может также проникнуть в щель через первый барьер, несколько раз (произвольное количество) отразиться от обоих барьеров и снова вернуться налево через первый барьер:

$$\rho_{12} = \rho_1 + \tau_1 \sum_{n=0}^{\infty} (\rho_2 \rho_1)^n \rho_2 \tau_1 = \rho_1 + \frac{\tau_1^2 \rho_2}{1 - \rho_1 \rho_2}, \quad (115)$$

что доказывает справедливость (58). Аналогичным образом получается амплитуда пропускания. Нейтрон может последовательно пройти через оба барьера, а может, перед тем как преодолеть второй барьер, несколько раз (произвольное количество) переотразиться в щели между ними:

$$\tau_{12} = \tau_2 \sum_{n=0}^{\infty} (\rho_2 \rho_1)^n \tau_1 = \frac{\tau_1 \tau_2}{1 - \rho_1 \rho_2}. \quad (116)$$

Рассмотрим теперь амплитуды отражения и пропускания отдельного, например первого, барьера. Обозначим амплитуды отражения и пропускания потенциального скачка, когда волна падает на скачок из вакуума, через ρ_{01}, τ_{01} соответственно, а когда изнутри потенциала — через ρ_{10}, τ_{10} соответственно. Обычное сшивание волновой функции на скачке дает

$$\rho_{01} = -\rho_{10} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}, \quad \tau_{01} = \frac{2k_0}{k_0 + k_1}, \quad \tau_{10} = \frac{2k_1}{k_0 + k_1}, \quad (117)$$

где k_0 — волновое число нейтрона в вакууме, а $k_1 = \sqrt{k_0^2 - u_1}$ — волновое число нейтрона внутри барьера.

Формула для отражения от одного барьера получается так же, как (115): нейтрон при отражении от барьера может отразиться сразу от первого скачка, а может также проникнуть внутрь барьера, несколько раз (произвольное количество) отразиться от обоих скачков, приобретая при этом фазовый множитель $\exp(2ik_1d)$, где d — ширина барьера, и снова вернуться налево через первый скачок:

$$\rho_1 = \rho_{01} + \tau_{10} \sum_{n=0}^{\infty} (\rho_{10}^2 e^{2ik_1d} \rho_{10})^n e^{2ik_1d} \rho_{10} \tau_{01} = \rho_{01} + \frac{\tau_{01} \tau_{10} \exp(2ik_1d) \rho_{10}}{1 - \rho_{10}^2 \exp(2ik_1d)}. \quad (118)$$

Учитывая соотношения (117), получим выражение (42).

Аналогичным образом получается формула пропускания. Нейтрон может последовательно пройти через оба скачка, а может, перед тем как преодолеть второй скачок потенциала, несколько раз (произвольное количество) переотразиться внутри барьера между скачками:

$$\tau_1 = \tau_{10} \exp(ik_1d) \sum_{n=0}^{\infty} (\rho_{10}^2 \exp(2ik_1d))^n \tau_1 = \frac{\tau_{10} \exp(ik_1d) \tau_{01}}{1 - \rho_{10}^2 \exp(2ik_1d)}. \quad (119)$$

Учитывая снова соотношения (117), получаем вторую формулу (42).

Эти выражения справедливы как для барьера $u_1 > 0$, так и для ямы $u_1 < 0$. Если на правом конце барьера установить бесконечный потенциал с отражением $\rho_{10} = -1$, то формула (118) перейдет в (37).

Список литературы

- [1] *Игнатович В.К., Останевич Ю.М., Чер Л.* Изомерный сдвиг и нейтронные резонансы: Сообщение ОИЯИ Р4-7296. Дубна, 1973.
- [2] *Meister A., Pabst D., Pikelner L.B., Seidel K.* Isomer-shift analogue in neutron resonances //Nucl. Phys. 1981. V. A362. P. 18—44.
- [3] *Mittag A., Pabst D., Pikelner L.B., Pilz W., Tschammer R., Meister A., Seeliger D., Seidel K.* Chemically induced shifts of ^{235}U and ^{234}U neutron resonances //Nucl. Phys. 1985. V. A435. P. 97—109.
- [4] *Игнатович В.К., Останевич Ю.М., Пантелеев Ц.* Изомерный сдвиг рентгеновских линий: Сообщ. ОИЯИ Р4-7695. Дубна, 1974.

- [5] *Игнатович В.К., Останевич Ю.М.* Квантово-механический переходной процесс в интерферометре //Кр. сообщ. ОИЯИ 7-85. Дубна, 1985. С. 12.
- [6] *Игнатович В.К., Останевич Ю.М., Подгорецкий М.И.* Способ получения голограмм без опорного пучка. Авторское свидетельство 745271, 7 марта 1980.
- [7] *Kalvius G.M.* Evaluation of isomer shifts //Hyperfine Interactions in Excited Nuclei/ Ed. G.Goldring, R.Kalish. N.Y., London, Paris: Gordon and Breach science publishers, 1971. V. 2. P. 523.
- [8] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. С. 752.
- [9] *De Wit S.A., Backenstoss G., Daum C., Sens J.C., Acker H.L.* //Nucl. Phys. 1967, V. 87. P. 657.
- [10] *Shenoy G.K., Kalvius G.M.* Table of change in Nuclear Mean Square Charge Radius //Hyperfine Interactions in Excited Nuclei /Ed.: G.Goldring, R.Kalish. N.Y., London, Paris: Gordon and Breach science publishers, 1971. V. 4. P. 1201—1237.
- [11] *Strutinsky V.M.* //Nucl. Phys. 1967. V. A95. P. 420.; Nucl. Phys. 1968. V. A122. P. 1.
- [12] *Band I.M., Fomichev V.I.* Electron densities at the Nuclear Center and Surface for “Mössbauer“ Atoms //Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1979. V. 23. No. 4. P. 295—314.
- [13] *Band I.M., Trzhaskovskaya M.B.:* LIYAF report 92. Gatchina, 1974.
- [14] *Alfimenkov V.P., Lason L., Mareev Yu.D., Ovchinnikov O.N., Pikelner L.B., Sharapov E.I.* //Nucl. Phys. 1976. V. A267. P. 172.
- [15] *Heilig K., Steudel A.* //Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1976. V. 14. P. 613.
- [16] *Бунатян Г.Г.* //ЯФ. 1977. Т. 26. С. 979.
- [17] *Бунатян Г.Г.* //ЯФ. 1979. Т. 29. С. 10.
- [18] *Бунатян Г.Г.* //ЯФ. 1982. Т. 35. С. 16.

- [19] *Лейн А., Томас Р.* Теория ядерных реакций при низких энергиях. М.: ИЛ, 1960.
- [20] *Ignatovich V.K.* The physics of ultracold neutrons. Oxford: Clarendon Press, 1990.
- [21] *Ignatovich V.K.* //Physica B. 1991. V. 175. P. 33.
- [22] *Ignatovich V.K.* Apocrypha of Standard Scattering Theory (SST) and Quantum mechanics of the de Broglie wave packet: JINR Commun. E4-2001-42. Dubna, 2001.
- [23] *de Broglie L.* Non-Linear Wave Mechanics: A Causal Interpretation. Amsterdam: Elsevier, 1960.
- [24] *Utsuro M., Ignatovich V.K.* Experimental test of the de Broglie wavepacket description of the neutron //Phys. Lett. 1998. V. A246. P. 7—15.
- [25] *Korneev D.A., Bodnarchuk V.I., Yaradaikin S.P., Peresedov V.F., Ignatovich V.K., Mennelle A., Gehler P.* Reflectometry studies of the neutron coherent properties //Physica B. 2000. V. 276—278, P. 973.
- [26] *Marshall W., Lovesey S.W.* Theory of Thermal Neutron Scattering. Oxford: Clarendon Press, 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 декабря 2001 года.

Игнатович В. К.

P4-2001-256

Химический сдвиг нейтронных резонансов и некоторые идеи, касающиеся теории резонансов и теории рассеяния

Рассматривается изменение положений нейтронных резонансов ядер в конденсированных средах при изменении химического состава вещества. Исследуется возможность теоретического описания нейтронных резонансов, отличающегося от R -матричного. Обсуждаются противоречия канонической теории рассеяния, и предлагается новый подход, не содержащий этих противоречий.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2001

Перевод автора

Ignatovich V. K.

P4-2001-256

Chemical Shift of Neutron Resonances and Some Ideas Related to Theory of Neutron Resonances and Scattering

The dependence of positions of neutron resonances in nuclei in condensed matter on chemical environment is considered. A possibility of theoretical description of neutron resonances different from R -matrix theory is investigated. Some contradictions of standard scattering theory are discussed and a new approach without these contradictions is formulated.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2001

Редактор А. Н. Шабашова. Макет Н. А. Киселевой

Подписано в печать 22.01.2002
Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. л. 3,24
Тираж 430. Заказ 53070. Цена 3 р. 24 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области