8. Daugiakanalė sklaidos teorija

Stipraus ryšio tarp kanalų metodas

Nagrinėsime sklaidos procesą

$$x + A \to x + A,$$

$$x + A \to x' + A^*,$$

nenaudodami perturbacijų teorijos. Tegul ξ bus taikinio A vidinių kintamųjų rinkinys, $\mathbf{r}$ – x dalelės erdvinė koordinatė. Į dalelių tapatingumą ir jų sukinius neatsižvelgsime.

Kanalo sąvoka. Dalelės sąveikos su taikiniu operatorius $\hat{V} = \hat{V}(\xi, \mathbf{r})$ bendru atveju nediagonalus taikinio būsenų $|n\rangle$ atžvilgiu. Reiškia taikinys dėl sąveikos su dalele gali pereiti iš būnos $|0\rangle$ į būseną $|n\rangle$ daug kartų arba pakeliui šokinėti po kitas būsenas, jeigu dalelės energijos šiems šokinėjimams pakanka, kol galiausiai atsidurs būsenoje $|n\rangle$. Jeigu po šių šokinėjimų taikinys atsidurs būsenoje $|0\rangle$, tai sakysime, kad sklaidos $x + A \to x + A$ pasekoje sistema $x + A$ atsidūrė elastiniame kanale. Jeigu taikinys perėjo į sužadintą būseną, pvz., $|n\rangle$ (buvo sužadintas), sakoma, kad sistema $x + A$ atsidūrė neelastiniame kanale.

Kanalo sąvoka aprašo sistemos $x+A$ būseną dideliame atstume tarp taikinio ir dalelės, kada sąveika tarp taikinio ir dalelės jau yra nežymi. Nedideliuose atstumuose, kur veikia operatorius $\hat{V}(\xi, \mathbf{r})$, įvairūs kanalai yra artimai susiję (sakoma surišti), kad būna sunku pasakyti, kokiame kanale $x + A$ sistema yra. Sklaidos teorija, kurioje atsižvelgiama į ryšį tarp skirtingų sklaidos kanalų, vadinama **daugiakanale sklaidos teorija**. Šios teorijos varijantas, kai atsižvelgiama tik į baigtinį skaičių tarpusavyje stipriausiai sąveikaujančių kanalų vadinamas **stipraus ryšio tarp kanalų metodu**. Dažnai sakoma **stipraus ryšio metodas**. Jame visų kitų kanalų indėlis atmetamas. Kaip atrenkami stipriausiai sąveikaujantys kanalai? Čia jau patirties ir intuicijos reikalas. Atrinkimas labai panašus į daugiakonfigūracinio metodo naudojimą atomų energijos spektrams skaičiuoti.

Stacionariojoje sklaidos teorijoje sklaidos procesas aprašomas sistemos $x+A$ bangine funkcija, kuri yra stacionariosios Šredingerio lygties sprendinys:

$$\hat{H}\Psi(\xi, \mathbf{r}) = E\Psi(\xi, \mathbf{r}). \tag{1}$$

Čia sistemos hamiltonianas $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{K} + \hat{V} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. Įvairias taikinio būsenas aprašančių funkcijų rinkinys $|n\rangle = \Phi_n(\xi)$ yra pilnas ir ortonormuotas.

Sistemos $x + A$ banginę funkciją (1) galima užrašyti taikinio banginių funkcijų tiesine kombinacija:

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(\mathbf{r})\Phi_n(\xi). \tag{2}$$

Čia sumos ženklas apima sumavimą pagal diskretinį ir integravimą pagal tolydinį spektrą. Taikinio pagrindinei būsenai priskiriame indeksą $n = 1$, o sužadintų būsenų energijos ε_n matuojamos nuo pagrindinio lygmens, todėl $\varepsilon_1 = 0$. Nuo sklaidomos dalelės koordinatės $\mathbf{r}$ priklausančios funkcijos $u_n(\mathbf{r})$ vadinamos **kanalo funkcijomis**.

Stipraus ryšio lygtys. Perėjimas prie stipraus ryšio tarp kanalų metodo reiškia, kad (2) lygtyje paliekamas baigtinis N skaičius kanalų, kurie atitinka taikinio pagrindinei ir egzistuojančioms sužadintoms būsenoms:

$$\Psi(\xi, \mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N} u_n(\mathbf{r})\Phi_n(\xi). \tag{3}$$

Kanalų atrinkimui griežtų kriterijų nėra. Viskas priklauso nuo konkretaus uždavinio. Reikia įjungti stipriausiai sąveikaujančius su taikinio pradine ir galine būsenomis kanalus.

Įrašę (3) į (1) ir atsižvelgę į taikinio banginių funkcijų ortonormavimo sąlygą, gauname lygčių sistemą kanalo funkcijoms surasti:

$$(\hat{h}_n - E)u_n(\mathbf{r}) = -\sum_{m\neq n} V_{nm}(\mathbf{r})u_m(\mathbf{r}), \tag{4}$$

kur dalelės sąveikos su taikiniu n-ajame kanale hamiltonianas pažymėtas šitaip:

$$\hat{h}_n = \hat{K} + \varepsilon_n + V_{nn}(\mathbf{r}). \tag{5}$$

Čia $\hat{K} = \hat{p}^2/2\mu$ – dalelės kinetinės energijos operatorius, o

$$V_{nm}(\mathbf{r}) = V^*_{mn}(\mathbf{r}) \equiv \langle n|\hat{V}|m\rangle = \int \Phi^*_n(\xi, \mathbf{r})\hat{V}(\xi, \mathbf{r})\Phi_m(\xi, \mathbf{r})d\xi \tag{6}$$

yra dalelės sąveikos su taikiniu operatoriaus matrica.

Lygčių sistemos (4) sprendiniai turi tenkinti šitokias asimptotines sąlygas:

$$u_n(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \begin{cases} e^{i\mathbf{kr}} + \text{išsiskleidžianti banga, kai } n = 1; \\ \text{išsiskleidžianti banga, kai } n > 1,\ E > \varepsilon_n; \\ \text{gęstanti banga, kai } n > 1,\ E < \varepsilon_n. \end{cases} \tag{7}$$

Pirmoji eilutė (7) išraiškoje atitinka fizikinei sąlygai, kad į taikinį, esantį būsenoje $|1\rangle$, iš begalybės skrieja dalelių, kurių judėjimo kiekis $\mathbf{k}$, srautas. Antroji eilutė atitinka neelastinės sklaidos kanalus, kurie dar vadinami atvirais, kai dalelės energijos pakanka taikiniui sužadinti. Trečioji eilutė aprašo uždarus kanalus, kai dalelės energijos per maža, kad taikinys būtų sužadintas.

Matematiniu požiūriu (4) lygčių sistema yra tarpusavyje susijusių antros eilės diferencialinių lygčių sistema. Galima parodyti, kad (4) lygčių sistema kartu su asimptotinėmis sąlygomis (7) ekvivalentiška integralinių lygčių sistemai:

$$u_n(\mathbf{r}) = \delta_{n1}\psi^{(+)}_{1,k_1}(\mathbf{r}) + \sum_{m\neq n} \int G^{(+)}_n(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')V_{nm}(\mathbf{r}')u_m(\mathbf{r}')d^3r', \tag{8}$$

kur $G^{(+)}_n(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ – viendalelinio uždavinio, aprašančio x dalelės judėjimą n kanale be sąveikos su kitais kanalais, Gryno funkcija. Jai surasti tinka (2.22) lygtis:

$$(\hat{h}_n - E)G^{(+)}_n(E,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{9}$$

Šios Gryno funkcijos asimptotika yra analogiška (2.37):

$$G^{(+)}_n(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')\Big|_{r\to\infty} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\mathbf{k}_n\mathbf{r}}}{r}\left[\psi^{(-)}_{n,\mathbf{k}_n}(\mathbf{r}')\right]^*, \tag{10}$$

kur $\mathbf{k}_n = k_n\mathbf{r}/r$ – kanale n išsklaidytos x dalelės judėjimo kiekio vektorius, $\psi^{(-)}_{n,k_n}(\mathbf{r}')$ – $\hat{h}_n$ hamiltoniano tikrinė funkcija. Ji ir $\psi^{(+)}_{n,\mathbf{k}_n}(\mathbf{r})$ tenkina viendalelę Šredingerio lygtį su asimptotika:

$$(\hat{h}_n - E)\psi^{(\pm)}_{n,\mathbf{k}_n}(\mathbf{r}) = 0,$$

$$\psi^{(\pm)}_{n,\mathbf{k}_n}(\mathbf{r})\Big|_{r\to\infty} = e^{i\mathbf{k}_n\mathbf{r}} + f(\theta)\frac{e^{+i\mathbf{k}_n\mathbf{r}}}{r}. \tag{11}$$

Atskiras (11) funkcijos atvejis yra $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$, kuris aprašo elastinę sklaidą. Šis sprendinys būtų tikslus, jeigu neatsižvelgtume į sąveiką su kitais kanalais.

Matome, kad daugiakanalis sklaidos uždavinys gali būti aprašytas tiek diferencialinių, tiek integralinių lygčių sistema. Jis apima elastinę ir neelastinę sklaidą. Elastiškai dalelė x gali būti išsklaidyta taikiniu, esančiu ne tik pagrindinėje, bet ir sužadintoje būsenoje.

Dviejų surištų kanalų uždavinys.

Pats paprasčiausias daugiakanalinio metodo taikymo pavyzdys yra dviejų surištų kanalų uždavinys.

Tegul $|1\rangle = \Phi_1(\xi)$ ir $|2\rangle = \Phi(\xi)$ yra taikinio A pagrindinė ir pirmoji sužadinta būsenos. Į visas kitas taikinio būsenas neatsižvelgsime, o lygmenis, kurių energijos $\varepsilon_1 = 0$ ir ε_2, laikysime neišsigimusiais. Tuomet sistemos $A + x$ banginę funkciją (2) galima užrašyti dviejų narių superpozicija:

$$\Psi(\xi,\mathbf{r}) = u_1(\mathbf{r})\Phi_1(\xi) + u_2(\mathbf{r})\Phi_2(\xi). \tag{12}$$

Jeigu dalelės energija $E < \varepsilon_2$, galima tiktai elastinė slaida. Nagrinėsime atvejį, kai abu kanalai atviri, t.y. $E > \varepsilon_2$. Šiuo atveju galimos elastinė ir neelastinė sklaidos.

Nagrinėjimo tikslas yra surasti:

1) sužadinimo diferencialinį skerspjūvį, nesinaudojant perturbacijų teorija;

2) kaip elastinę sklaidą paveikia neelestinės sklaidos galimybė.

Į šiuos klausimus galima atsakyti išsprendus (4) arba (8) lygčių sistemas ir suradus kanalų funkcijas $u_1(\mathbf{r})$ ir $u_2(\mathbf{r})$, tenkinančias (7) asimptotikos sąlygas.

Dviejų kanalų atveju diferencialinis uždavinio formulavimas yra:

$$\begin{cases} (\hat{h}_1 - E)u_1 = -V_{12}u_2, \\ (\hat{h}_2 - E)u_2 = -V_{21}u_1 \end{cases}; \tag{13}$$

$$\begin{cases} u_1(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} + \text{išsiskleidžianti banga}, \\ u_2(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \text{išsiskleidžianti banga}. \end{cases} \tag{14}$$

Tos pačios lygtys integraliniu pavidalu yra šitokios:

$$\begin{cases} u_1(\mathbf{r}) = \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) + \int G^{(+)}_1(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')V_{12}(\mathbf{r}')u_2(\mathbf{r}')d^3r', \\ u_2(\mathbf{r}) = \int G^{(+)}_2(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')V_{21}(\mathbf{r}')u_1(\mathbf{r}')d^3r'. \end{cases} \tag{15}$$

Pasinaudoję Gryno operatoriumi

$$\hat{G}^{(+)}_n(E) = \frac{1}{E^{(+)} - \hat{h}_n}, \tag{16}$$

(15) lygčių sistemą galime perrašyti ir taip:

$$\begin{cases} u_1(\mathbf{r}) = \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) + \hat{G}^{(+)}_1(E)V_{12}u_2(\mathbf{r}), \\ u_2(\mathbf{r}) = \hat{G}^{(+)}_2(E)V_{21}u_1(\mathbf{r}). \end{cases} \tag{17}$$

Spęskime (13) ir (17) lygčių sistemas. Pradžioje iš abiejų lygčių eliminuokime u_2 funkciją:

$$(\hat{h}_1 - E)u_1 = -V_{12}\,\hat{G}^{(+)}_2(E)\,V_{21}\,u_1, \tag{18}$$

$$u_1 = \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1} + \hat{G}^{(+)}_1(E)V_{12}\,\hat{G}^{(+)}_2(E)\,V_{21}\,u_1. \tag{19}$$

Prisiminkime, kad $\hat{h}_1$ yra vienkanalio uždavinio hamiltonianas:

$$\hat{h}_1 = \hat{K} + V_{11}(\mathbf{r}), \tag{20}$$

kur $V_{11}(\mathbf{r}) = \langle 1|\hat{V}(\xi,\mathbf{r})|1\rangle$ – x dalelės sąveikos su A taikiniu potencinė energija, suvidurkinta taikinio pagrindinės būsenos funkcijų atžvilgiu, t.y. suintegruota pagal $d\xi$. (18) išraiškai galima suteikti dalelės judėjimo potencialo lauke Šredingerio lygties pavidalą vietoje $V_{11}(\mathbf{r})$ potencialo įvedus efektinį potencialą:

$$(\hat{K} + \hat{V}^{ef} - E)u_1 = 0, \tag{21}$$

kur dalelės sąveikos su taikiniu elastinės sklaidos kanale efektinis potencialas yra:

$$V_{11}(\mathbf{r}) \to \hat{V}^{ef} = V_{11} + V_{12}\hat{G}_2^{(+)}(E)V_{21}. \tag{22}$$

Efektinio potencialo operatoriui $\hat{V}^{ef}$ būdingos kai kurios savybės, besiskiriančios nuo vidutinio potencialo $V_{11}(\mathbf{r})$:

a) jis visada priklauso nuo sklaidomos dalelės energijos E;

b) jis yra nelokalinis operatorius, nes juo veikdami bet kokią funkciją $\mathbf{r}$ taške, paveikiame šios funkcijos reikšmes visoje $\mathbf{r}$ kitimo srityje:

$$\hat{V}^{ef}u(\mathbf{r}) = V_{11}(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) + \int V_{12}(\mathbf{r})\hat{G}_2^{(+)}(E,\mathbf{r},\mathbf{r}')V_{21}(\mathbf{r}')u(\mathbf{r}')d^3r'; \tag{23}$$

c) jis yra neermitinis operatorius

$$(\hat{V}^{ef})^+ \neq \hat{V}^{ef}. \tag{24}$$

Integrodiferencialinės lygties (18) užrašymas (21) lygties pavidalu yra grynai formalus, nes neaišku, kaip (21) lygtį spręsti. Tačiau jis naudingas tuo požiūriu, kad iš (21) lygties matyti, kaip neelastinė sklaida paveikia elastinės sklaidos charakteristikas.

Elastinės ir neelastinės sklaidos tikimybė. S matrica

Sklaidos teorijos tikslas surasti diferencialinio ir pilnutinio skerspjūvių išraiškas. Daugiakanalės teorijos atveju šios išraiškos turėtų būti užrašoma kanalų $u_n(\mathbf{r})$ funkcijomis. Jau žinome, kad diferencialinis skerspjūvis proporcingas tikimybei, o pastaroji – sklaidos amplitudės kvadratui. Elastinės sklaidos tikimybė proporcinga amplitudei, esančiai u_1 funkcijos asimptotikoje (14) prieš išsiskleidžiančią sferinę funkciją. Neelastinės sklaidos (sužadinimo) tikimybė proporcinga amplitudei u_n $(n > 1)$ asimptotikoje prieš išsiskleidžiančią sferinę funkciją $(\varepsilon_n < E)$. Panaudodami (10) ir (11) formules iš (8) lygčių sistemos surandame $u_n(\mathbf{r})$ funkcijos asimptotinę išraišką atviruose kanaluose:

$$u_n(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = \delta_{n1}\left(e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} + f_1(\mathbf{k}_1',\mathbf{k}_1)\frac{e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}}{r}\right)$$
$$-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\mathbf{k}_n\mathbf{r}}}{r}\sum_{m\neq n}\int \Psi^{(-)*}_{n,\mathbf{k}_n'}(\mathbf{r}')V_{nm}(\mathbf{r}')u_m(\mathbf{r}')d^3r'. \tag{25}$$

Iš (25) išraiškos galima užrašyti elastinės sklaidos amplitudę:

$$F_{elast}(\mathbf{k}_1',\mathbf{k}_1) = f_1(\mathbf{k}_1',\mathbf{k}_1) + \Delta F_{elast}(\mathbf{k}_1',\mathbf{k}_1), \tag{26}$$

kurioje pirmasis narys $f_1(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_1)$ yra sklaidos potencialu $V_{11}(\mathbf{r})$ amplitudė, o antrasis narys yra elastinės sklaidos amplitudė, atsirandanti dėl ryšio tarp elastinės ir neelastinės sklaidos kanalų:

$$\Delta F_{elast}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_1) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \sum_{m \neq n} \int \Psi^{(-)*}_{1,\mathbf{k}'_1}(\mathbf{r}') V_{1m}(\mathbf{r}') u_m(\mathbf{r}') d^3 r'. \tag{27}$$

Diferencialio skerspjūvio išraiška

$$\frac{d\sigma_{elast}}{d\Omega} = |f_1(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_1) + \Delta F_{elast}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_1)|^2 \tag{28}$$

rodo, kad vienkanalės sklaidos amplitudė ir priedas dėl sąveikos su kitais kanalais interferuoja, nes jų suma keliama kvadratu.

Iš (25) išraiškos galima surasti ir neelastinės sklaidos amplitudę:

$$F_n(\mathbf{k}'_n, \mathbf{k}_1) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \sum_{m \neq n} \int \Psi^{(-)*}_{n,\mathbf{k}'_n}(\mathbf{r}') V_{nm}(\mathbf{r}') u_m(\mathbf{r}') d^3 r'. \tag{29}$$

Ji surasta iš $u_n(\mathbf{r})$ asimptotikos (25), kai $n \neq 1$ ir $E > \varepsilon_n$:

$$u_n(\mathbf{r})|_{r \to \infty} = F_n(\mathbf{k}'_n, \mathbf{k}_1) \frac{e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{r}}}{\mathbf{r}}. \tag{30}$$

Norint surasti neelastinės sklaidos direfencialinį skerspjūvį, reikalingas dalelių, išsklaidytų $n \neq 1$ kanale, srovės radialusis tankis. Jis randamas pagal bendrą srovės tankio formulę (2.50), naudojant (30) funkciją:

$$(jE)_{n \neq 1}|_{r \to \infty} = \frac{\hbar k_n}{\mu} \frac{|F_n(\mathbf{k}'_n(\mathbf{k}_1)|^2}{r^2}. \tag{31}$$

Iš (7) sąryšio matome, kad pirmoje eilutėje priešais eksponentę yra vienetas. Šitaip parinkus plokščios bangos normavimą, sklaidomų dalelių srovės tankis mums gerai žinomas: $j_0 = \hbar k_1/\mu$. Tuomet neelastinės sklaidos diferencialinis skerspjūvis yra šitoks:

$$\frac{d\sigma_n}{d\Omega} = \frac{k_n}{k_1} |F_n(\mathbf{k}'_n, \mathbf{k}_1)|^2. \tag{32}$$

Suradus bangines funkcijas $u_n(\mathbf{r})$, jau galima apskaičiuoti elastinės ir neelastinės sklaidos diferencialinius skerspjūvius.

Dabar mokysimės ieškoti $u_n(\mathbf{r})$ funkcijų. Kai sklaidomos dalelės x energija E nėra didelė, stipraus ryšio lygtis patogu spręsti išskleidus $u_n(\mathbf{r})$ funkciją sferinėmis funkcijomis. Svarbiausia, kad sistemos $A + x$ pilnutinis judėjimo kiekio momentas J būtų geras kvantinis skaičius, t.y. proceso metu išliktų nepakitęs. Paprastumo dėlei į sukinius ir pakaitines sąveikas neatsižvelgsime, todėl sistemos orbitinis judėjimo kiekio momentas L bus geras kvantinis skaičius ir sklaidos proceso metu išliks pastovus. Pavyzdžiu pasirinksime elektrono sklaidą vandenilio atomu. Turėkime omenyje, kad sprendimas bus schematiškas, nes į sukinius ir elektronų tapatingumą neatsižvelgiama.

Tegul elektronas, kurio judėjimo kiekis $\mathbf{k}_0$, susiduria su vandenilio atomu pagrindinėje būsenoje 1s. Tuomet sistemos elektronas+atomas pilnutinis judėjimo kiekio momentas **L**=**l**+0 bus lygus sklaidomo elektrono judėjimo kiekio momentui **l**. Galinėje būsenoje sistemos orbitinis judėjimo kiekio momentas bus lygus elektrono ir atomo orbitinių judėjimo kiekio momentų vektorinei sumai **L**'=**l**'+$\mathbf{l}_a$. Dabar vietoje funkcijos $|n\rangle$ galime įrašyti funkciją $|n_a l_a m_a\rangle$, aprašančią atomo būsenas. Kvantiniai skaičiai LM aprašys sistemos būseną, m_a ir M – $\mathbf{l}_a$ ir $\mathbf{L}$ projekcijos į pasirinktą ašį (kryptį). Sistemos "elektronas+vandenilio atomas" susietų momentų banginę funkciją galima užrašyti šitaip:

$$\Psi_{LM}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \sum_{n_a,L_a,l} \{\phi_{n_a l_a}(\mathbf{r}_1) u_{n_a l_a,l}(\mathbf{r}_2)\}_{LM}. \tag{33}$$

Čia indeksas 1 žymi atomo elektroną, 2 – sklaidomą elektroną, o figūriniuose skliaustuose yra:

$$\{\phi_{n_a l_a}(\mathbf{r}_1) u_{n_a l_a,l}(\mathbf{r}_2)\}_{LM} = \sum_{m_a,m} \begin{bmatrix} l_a & l & L \\ m_a & m & M \end{bmatrix} \phi_{n_a l_a m_a}(\mathbf{r}_1) u_{n_a l_a,lm}(\mathbf{r}_2). \tag{34}$$

kur laužtiniuose skliaustuose yra Klebšo ir Gordano koeficientas,

$$u_{n_a l_a,lm}(\mathbf{r}) = R_{n_a l_a,l}(r) Y_{lm}(\theta,\phi). \tag{35}$$

Čia $Y_{lm}(\hat{n})$ – sferinė funkcija, $R_{n_a l_a,l}(r)$ – radialioji funkcija, aprašanti atomo ir sklaidomą elektronus.

Įrašę (33) į Šredingerio lygtį (1), turime lygčių sistemą, panašią į (4), radialiosioms funkcijoms surasti. Ją patogiau spręsti įvedus kitą radialiąją funkciją $g_{n_a l_a,l}(r) = rR_{n_a l_a,l}(r)$, kurią naudodami surandame šią lygčių sistemą:

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \varepsilon_{n_a} + V^{(L)}_{n_a l_a l, n_a l_a l}(r)\right) g_{n_a l_a,l}(r) \\ &\qquad = -\sum_{n'_a l'_a l'} V^{(L)}_{n_a l_a l, n'_a l'_a l'}(r) g_{n'_a l'_a,l'}(r), \end{aligned} \tag{36}$$

kur

$$\begin{aligned} V^{(L)}_{n_a l_a l, n'_a l'_a l'}(r_2) = &\sum_{m_a,m,m'_a,m'} \begin{bmatrix} l_a & l & L \\ m_a & m & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l'_a & l' & L \\ m'_a & m' & M \end{bmatrix} \\ &\times \int \phi^*_{n_a l_a m_a}(\mathbf{r}_1) Y^*_{lm}(\hat{n}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \phi_{n'_a l'_a m'_a}(\mathbf{r}_1) Y_{l'm'}(\hat{n}_2) r_1^2 dr_1 d\Omega_1 d\Omega_2. \end{aligned} \tag{37}$$

Iš (37) matyti, kad matriciniai elementai priklauso nuo sklaidomo elektrono radialiosios koordinatės r_2, bet nepriklauso nuo atomo elektrono radialiojo kintamojo r_1. Operatorius e^2/r_{12} nepriklauso nuo M projekcijos, nes šis operatorius nepriklauso nuo kvantavimo ašies parinkimo, t.y. invariantiškas posūkių erdvėje atžvilgiu.

Iš (7) seka papildoma asimptotikos sąlyga radialiajai funkcijai (žr. (4.19))

$$g_n^{(n')}(r)|_{r\to\infty} \sim \delta_{nn'} e^{-i(k_n r - l\pi/2)} - S_{nn'} e^{i(k_n r - l\pi/2)}, \tag{38}$$

kur $n \equiv (n_a l_a l)$ žymi kanalų, o $n' \equiv (n'_a l'_a l')$ rodo sprendinio numerį. (36) lygties sprendiniai, tenkinantys papildomą (38) sąlygą, leidžia surasti sklaidos S matricą. Ją žinant surandamos elastinės ir neelastinės sklaidos tikimybės.

Pagrindinė stipraus ryšio metodo problema yra konvergavimas. Čia yra dviejų tipų skleidiniai – pagal kanalus (3) ar (33) ir pagal dalines bangas. Šios abi problemos tampriai tarpusavyje susijusios, nes stipraus ryšio lygtys sprendžiamos skaitmeniškai. Praktiškai optimalūs dalinių bangų ir kanalų skaičiai parenkami taip, kad galutinis skaičiavimo rezultatas – diferencialinis ar pilnutinis skerspjūvis – užduotu tikslumu nepriklausytų nuo šių skaičių varijacijų.

Iškraipytų bangų metodas.

Spęsdami dviejų kanalų uždavinį iš (17) lygties išeliminavome $u_2(\mathbf{r})$ funkciją. Dabar iš (17) lygties išeliminuokime $u_1(\mathbf{r})$ funkciją. Gauname antrojo kanalo funkcijos išraišką:

$$u_2 = \hat{G}_2^{(+)}(E) V_{21}\{\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} + \hat{G}_1^{(+)}(E) V_{12} u_2\}. \tag{39}$$

Ši formulė yra integralinė lygtis $u_2(\mathbf{r})$ funkcijai surasti. Vienas iš jos sprendimo būdų gali būti iteracinis, t.y. į (35) pusės antrąjį narį vietoje u_2 vėl įrašoma visa (**??**) funkcija:

$$u_2 \approx \hat{G}_2^{(+)}(E) V_{21}\{\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} + \hat{G}_1^{(+)}(E) V_{12} \hat{G}_2^{(+)}(E) V_{21}\{\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} + \ldots\}. \tag{40}$$

Iteracinė eilutė (40) konverguoja tuo geriau, kuo sąveika tarp elastinio ir neelastinio kanalų V_{12} silpnesnė. Kanalo funkcija $u_2(\mathbf{r})$ tenkina asimptotikos sąlygas (14), kas užtikrina ir Gryno funkcijos asimptotiką. Įrašius $G_2^{(+)}$ (10) į (39), gaunama, kad $u_2(\mathbf{r})$ kanalo funkcijos asimptotika yra:

$$u_2(\mathbf{r})|_{r\to\infty} = F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)\frac{e^{i\mathbf{k}_2,\mathbf{r}}}{r}, \tag{41}$$

kur $\mathbf{k}_2$ – kanalu 2 išklaidytos dalelės judėjimo kiekis,

$$F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \psi_{2,\mathbf{k}_2}^{(-)} V_{21}(\mathbf{r})\{\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} + \hat{G}_1^{(+)}(E) V_{12} u_2\} d^3 r \tag{42}$$

yra neelastinės sklaidos amplitudė, kuriai surasti reikalingas tikslus (39) lygties sprendinys. Jeigu normuotas iškraipytas bangas $\psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)}$ ir $\psi_{2,\mathbf{k}_2}^{(-)}$ parinktume šitokias:

$$\begin{cases} \psi_{1,\mathbf{k}_1}^{(+)} = e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} + \text{išsiskleidžianti banga}, \\ \psi_{2,\mathbf{k}_2}^{(-)} = e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{r}} + \text{sueinanti banga}, \end{cases} \tag{43}$$

tai neelastinės sklaidos diferencialinį skerspjūvį galėtume užrašyti pagal bendrą (32) formulę:

$$\frac{d\sigma_2}{d\Omega} = \frac{k_2}{k_1}|F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)|^2. \tag{44}$$

Iki šiol padarėme tiktai vieną prielaidą, t.y. apsiribojome dviem kanalais, todėl (44) ir (42) išraiškos dviejų kanalų artinyje yra tikslios. **Iškraipytų bangų artinio** neelastinei sklaidai esmę sudaro tikslios kanalo funkcijos $u_1 = \psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1} + \hat{G}^{(+)}_1(E)V_{12}u_2$ (42) išraiškoje pakeitimas viena funkcija $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$. Tuomet amplitudė yra šitokia:

$$F_{21}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})V_{21}(\mathbf{r})\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})d^3r. \tag{45}$$

Taigi, iškraipytų bangų artinys yra perturbacijų teorija pagal tarpkanalinę sąveiką. Jo skirtumas nuo 6 skyriuje nagrinėtos perturbacijų teorijos yra tas, kad vietoje plokščių bangų naudojamos iškraipytos bangos. Joms surasti lygtyse (13) paliekama sąveikos tarp dalelės ir taikinio tiktai diagonali kanalų atžvilgiu dalis:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{11}(\mathbf{r}) - E\right]\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) = 0,$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{22}(\mathbf{r}) - E\right]\psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}) = 0. \tag{46}$$

Belieka užrašyti neelastinės sklaidos (sužadinimo) diferencialinį skerspjūvį iškraipytų bangų artinyje (F_{21} keliamas kvadratu ir įrašoma V_{21} išraiška):

$$\frac{d\sigma_2}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{k_2}{k_1}\left|\int\int \psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})\Phi^*_2(\xi)\hat{V}(\xi,\mathbf{r})\Phi_1(\xi)\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})d\xi d^3r\right|^2, \tag{47}$$

kur $\Phi_1(\xi)$ ir $\Phi_2(\xi)$ – taikinio pradinės ir galinės būsenų banginės funkcijos. Jeigu vietoje iškraipytų bangų į (47) įrašytume plokščias bangas , t.y. $\psi^{(+)}_{1,\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) \to e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}$ ir $\psi^{(-)}_{2,\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}) \to e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{r}}$, gautume Borno artinio (7.22) ir (7.23) formules.