§2. T- и S-матрицы, связь с сечением рассеяния.

1. Вернемся к описанию потенциального рассеяния. Для амплитуды рассеяния имеем:

$$f(\theta) = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2}\left\langle \varphi_{k'} \left| \hat{V} \right| \phi_k^{(+)} \right\rangle \qquad (1.51)$$

Подставим сюда вместо $\left|\phi_k^{(+)}\right\rangle$ формальное решение уравнения Липпмана-Швингера:

$$f(\theta) = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2}\left\langle \varphi_{k'} \left| \hat{V} \left[\left| \varphi_k \right\rangle + G^{(+)}(E)\hat{V} \right| \varphi_k \right\rangle \right] =$$

$$= -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \cdot \left\langle \varphi_{k'} \right| \cdot \left[\hat{V} + \hat{V} G^{(+)}(E)\hat{V} \right] \cdot \left| \varphi_k \right\rangle \qquad (1.72)$$

Определим оператор $\hat{T}$ следующим соотношением:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} G^{(+)}(E)\hat{V} \qquad (1.73)$$

Для амплитуды рассеяния и сечения рассеяния будем иметь:

$$f(\theta) = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2}\left\langle \varphi_{k'} \left| \hat{T} \right| \varphi_k \right\rangle \qquad (1.74)$$

$$\sigma(\theta) = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} \cdot \left| \left\langle \varphi_{k'} \left| \hat{T} \right| \varphi_k \right\rangle \right|^2 \qquad (1.75)$$

Оператор $\hat{T}$ называется **<u>оператором переходов.</u>** Он определяет вероятность переходов между состояниями сплошного спектра в процессах столкновений. Соотношение (1.73) носит общий характер и справедливо для любых процессов в системе сталкивающихся тел. Соответственно, Т-матрица называется **<u>матрицей переходов.</u>** Для нее имеет место соотношение:

$$\left\langle \varphi_{k'} \left| \hat{T} \right| \varphi_k \right\rangle = \left\langle \varphi_{k'} \left| \hat{V} \right| \phi_k^{(+)} \right\rangle \qquad (1.76)$$

Согласно (1.75) сечение рассеяния пропорционально квадрату модуля элемента Т-матрицы. Преимущество выражения (1.74) по сравнению с формулой (1.51) состоит в том, что в первом случае может быть использован аппарат матричной алгебры. Выражение же (1.51) не является матричным элементом какого-либо оператора.

2. В нестационарном подходе изменение волновой функции $\phi(t)$ со временем задается оператором эволюции:

$$\phi(t) = \hat{U}(t, t') \cdot \phi(t') \qquad (1.77)$$

Здесь $\hat{U}(t, t')$ - оператор эволюции. Он переводит волновую функцию, заданную в момент времени t', в волновую функцию, заданную в момент времени t. Волновые функции ϕ являются решениями временного уравнения Шредингера:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} = \hat{H}\phi \qquad (1.78),$$

где оператор $\hat{H}$ - полный гамильтониан системы сталкивающихся тел. Будем процесс рассеяния во времени рассматривать следующим образом. В достаточно отдаленный момент времени $(t' \to -\infty)$ сталкивающиеся частицы находились на большом расстоянии друг от друга вне зоны взаимодействия, так что полный гамильтониан системы сводится к свободному гамильтониану $\hat{H}_o$. В некоторый момент времени (например, $t = 0$) происходит сближение сталкивающихся частиц. Они взаимодействуют, в результате взаимодействия происходит рассеяние или, в общем случае, реакция. Через определенный длительный промежуток времени (при $t \to +\infty$) рассеянные частицы или продукты реакции между ними снова находятся на большом расстоянии друг от друга, так что взаимодействие “выключено” , и состояния системы являются собственными состояниями свободного гамильтониана $\hat{H}_o$. Встает вопрос , как связаны между собой состояния системы сталкивающихся тел после взаимодействия с их состояниями до процесса столкновения ? Ответ на этот вопрос дает теория S-матрицы.

Пусть оператор $\hat{H}_o$ имеет полную ортонормированную систему состояний:

$$\hat{H}_o \left| \Phi_\kappa \right\rangle = E_\kappa \left| \Phi_\kappa \right\rangle \qquad (1.79),$$

$$\left\langle \Phi_i \middle| \Phi_j \right\rangle = \delta_{ij} \qquad (1.80)$$

В момент времени $t \to -\infty$ система находилась в некотором i-ом состоянии,так что :

$$\left| \phi(-\infty) \right\rangle = \left| \Phi_i \right\rangle \qquad (1.81)$$

Используя (1.77) и (1.81), будем иметь:

$$\left| \phi(+\infty) \right\rangle = \hat{U}(+\infty,-\infty) \left| \phi(-\infty) \right\rangle = \hat{U}(+\infty,-\infty) \left| \Phi_i \right\rangle \qquad (1.82)$$

Вектор состояния $\left| \phi(+\infty) \right\rangle$ является некоторой суперпозицией состояний $\left| \Phi_j \right\rangle$:

$$\left| \phi(+\infty) \right\rangle = \sum_j S_{ji} \left| \Phi_j \right\rangle \qquad (1.83)$$

Здесь S_{ji} -коэффициенты суперпозиции. Пусть $\left| \Phi_f \right\rangle$ -одно из собственных состояний оператора $\hat{H}_o$:

$$H_o \left| \Phi_f \right\rangle = E_f \left| \Phi_f \right\rangle \qquad (1.84)$$

Найдем все состояния $\left| \Phi_f \right\rangle$ в состоянии $\left| \phi(+\infty) \right\rangle$.Вычисляя соответствующее скалярное произведение, будем иметь:

$$\left\langle \Phi_f \middle| \phi(+\infty) \right\rangle = \left\langle \Phi_f \middle| \hat{U}(+\infty,-\infty) \middle| \Phi_i \right\rangle =$$

$$= \left\langle \Phi_f \middle| \sum_j S_{ji} \middle| \Phi_j \right\rangle = S_{fi} \qquad (1.85)$$

В последнем равенстве использовано свойство ортонормированности состояний $\left| \Phi_k \right\rangle$ (см. формулу (1.80). Таким образом, из (1.85) следует, что:

$$S_{fi} = \left\langle \Phi_f \middle| \hat{U}(+\infty,-\infty) \middle| \Phi_i \right\rangle \qquad (1.86)$$

Введем S-оператор:

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t \to \infty \\ t' \to -\infty}} \hat{U}(t,t') \qquad (1.87)$$

Из (1.87) следует, что S-оператор является пределом оператора эволюции, а S-матрица – матрицей предела оператора эволюции в пространстве собственных состояний свободного гамильтониана $\hat{H}_o$ (см. формулу (1.86)). В квантовой теории рассеяния S- оператор называется **оператором рассеяния**, а S-матрица – **матрицей рассеяния**.

3. Рассмотрим некоторые свойства и соотношения для оператора рассеяния. В нестационарной теории может быть найден явный вид оператора эволюции:

$$\hat{U}(t,t') = \exp\{-\frac{i}{\hbar} \cdot \hat{H}(t-t')\} \qquad (1.88)$$

Из этого соотношения следует **унитарность** S-оператора:

$$\hat{S}^{+}\hat{S} = \hat{I} \qquad (1.89)$$

Здесь $\hat{I}$ - единичный оператор. Записывая (1.89) в матричной форме, получаем:

$$\sum_f |S_{fi}|^2 = 1 \qquad (1.90)$$

В силу однородности времени и изотропии пространства S- оператор коммутирует с полным гамильтонианом $\hat{H}$ и оператором квадрата углового момента всей системы $\hat{J}^2$:

$$\left[\hat{S},\hat{H}\right] = 0 \qquad \left[\hat{S},\hat{J}^2\right] = 0 \qquad (1.91)$$

Последнее обстоятельство делает предпочтительным при теоретическом описании процессов столкновений выбор **представления оператора квадрата углового момента всей системы**, в котором S –оператор диагонален.

Существует связь между S-матрицей и матрицей переходов.

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \cdot \delta(E_f - E_i) T_{fi} \qquad (1.92)$$

Здесь δ_{fi} - символ Кронекера, а $\delta(E_f - E_i)$ отражает закон сохранения энергии. Отметим два отличия S-матрицы от T-матрицы. Наиболее существенное отличие состоит в том, что S-матрица определена только между состояниями с одной и той же энергией. Другими словами, S-матрица определена только на **энергетической поверхности** , в то время как T-матрица определена и на **внеэнергетической поверхности**. Менее существенное различие состоит в том, что S-матрица – безразмерная физическая величина, T-матрица же имеет размерность.

4. В связи с рассмотрением в квантовой теории рассеяния S-матрицы можно выделить два принципиально различных подхода в теории столкновений. Первый подход, так называемый **потенциальный**, состоит в том, что задается оператор взаимодействия $\hat{V}$ из физических соображений, находятся T-матрица или S-матрица и строятся сечения рассеяния. Из сравнения сечений вычисленных с экспериментальными извлекается информация о характере взаимодействия и свойствах потенциала. Второй подход – **S-матричный,** состоит в том, что S-матрица не вычисляется на основе потенциала взаимодействия, а параметризуется на основе свойств симмерии рассматриваемой системы. Такой подход не дает непосредственно информации о свойствах потенциала, но тем не менее оказывается конструктивным и обладает предсказательной силой. В рамках S-матричного подхода были развиты различные новые направления в анализе экспериментальных данных: теория Брейта-Вигнера, методов полюсов Редже, квазиклассическое приближение и др.