

Ю. Н. ДЕМКОВ

ПРИНЦИП ДЕТАЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ И НЕКОТОРЫЕ ТОЖДЕСТВА ДЛЯ АМПЛИТУД РАССЕЯНИЯ В ТЕОРИИ СТОЛКНОВЕНИЙ

(Представлено академиком В. А. Фоком 12 IV 1954)

Рассмотрим задачу о рассеянии частиц потенциальным полем в квантовой механике. В этом случае надо найти решение уравнения

$$[\nabla^2 + k^2 - V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (1)$$

имеющее при больших r асимптотический вид

$$\Psi(r) \sim e^{ik\vec{v}r} + f(\vec{v}, \mathbf{n}) \frac{e^{ikr}}{kr}. \quad (2)$$

Здесь $\vec{v}$ — единичный вектор, характеризующий направление падающей волны, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Предполагаем, что потенциал $V(\mathbf{r})$ непрерывен, вообще говоря, не обладает сферической симметрией и убывает при больших r не медленнее, чем $1/r^2$. Квадрат модуля амплитуды рассеяния $|f(\vec{v}, \vec{v}')|^2$ определяет вероятность рассеяния частицы из направления $\vec{v}$ в направлении $\vec{v}'$.

Введем функционал

$$J(\varphi_1, \varphi_2) = \int \varphi_1 [\nabla^2 + k^2 - V(\mathbf{r})] \varphi_2 d\tau, \quad (3)$$

который использовался при выводе вариационных принципов в теории столкновений (1, 2). Предполагаем, что функции φ_1, φ_2 имеет при больших r асимптотический вид

$$\varphi_i \sim e^{ik\vec{v}_i r} + F_i(\mathbf{n}) \frac{e^{ikr}}{kr}, \quad (4)$$

где функции $F_i(\mathbf{n})$, вообще говоря, не равны точной амплитуде рассеяния $f(\vec{v}_i, \mathbf{n})$.

Выясним, какие следствия можно получить из условия

$$J(\varphi_1, \varphi_2) = J(\varphi_2, \varphi_1), \quad (5)$$

которое, очевидно, выполняется для точных волновых функций Ψ_1, Ψ_2 , удовлетворяющих уравнению (1). Обе части равенства (5) обращаются при этом в нуль.

Используя теорему Грина, получаем

$$\int (\varphi_1 \nabla^2 \varphi_2 - \varphi_2 \nabla^2 \varphi_1) d\tau = \lim_{R \rightarrow \infty} \oint_{S_R} \left(\varphi_1 \frac{\partial \varphi_2}{\partial r} - \varphi_2 \frac{\partial \varphi_1}{\partial r} \right)_{r=R} dS. \quad (6)$$

Интегрирование в поверхностном интеграле производится по сфере радиуса R . Вместо функций φ_1, φ_2 в формулу (6) можно подставить

их асимптотический вид (4). При этом мы разложим плоскую волну $e^{ik(\vec{v}\vec{r})}$ и функции $F_l(\mathbf{n})$ в ряд по сферическим функциям. Тогда

$$\varphi_l \sim \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ (2l+1) \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr) P_l(\vec{v}_l \mathbf{n}) + Y_l^{(i)}(\mathbf{n}) \frac{e^{ikr}}{kr} \right\}, \quad (7)$$

где $J_{l+1/2}$ — бесселевы функции с полуцелым индексом, а $Y_l^{(i)}(\mathbf{n})$ — некоторые сферические функции порядка l , явный вид которых нам не понадобится.

Подставляем (7) в (6) и используем асимптотический вид функций Бесселя, а также теорему сложения для сферических функций

$$\int Y_l(\mathbf{n}) P_l(\vec{v} \mathbf{n}) d\omega = \frac{4\pi}{2l+1} Y_l(\vec{v}) \delta_{ll'}. \quad (8)$$

Интегрирование здесь производится по всем направлениям единичного вектора $\mathbf{n}$. Тогда получаем

$$\sum_{l=0}^{\infty} (-)^l Y_l^{(1)}(\vec{v}_2) = \sum_{l=0}^{\infty} (-)^l Y_l^{(2)}(\vec{v}_1) \quad (9)$$

или

$$F_1(-\vec{v}_2) = F_2(-\vec{v}_1). \quad (10)$$

Для точной амплитуды рассеяния f получаем

$$f(\vec{v}_1, -\vec{v}_2) = f(\vec{v}_2, -\vec{v}_1). \quad (11)$$

Уравнение (11) должно выполняться для любых $\vec{v}_1$ и $\vec{v}_2$. Оно связано с так называемым принципом обратимости или принципом детального равновесия для данной задачи.

Рассмотрим, далее, неупругий удар электрона с атомом. Пусть волновое число, направление электрона и состояние атома до столкновения будут $k_a, \vec{v}_a, \psi_a$, а после столкновения, соответственно, $k_b, \vec{v}_b, \psi_b$. Тогда принцип детального равновесия будет следовать из симметрии функционала

$$J(\Psi_a, \Psi_b) = \int \Psi_a (H - E) \Psi_b d\tau, \quad (12)$$

где H — оператор энергии системы, E — полная энергия, а волновые функции Ψ_a, Ψ_b прямого и обратного процессов имеют асимптотический вид

$$\begin{aligned} \Psi_a &\sim \bar{\psi}_a e^{ik_a \vec{v}_a \vec{r}} + \text{расходящиеся волны;} \\ \Psi_b &\sim \bar{\psi}_b e^{ik_b \vec{v}_b \vec{r}} + \text{расходящиеся волны.} \end{aligned} \quad (13)$$

Из условия

$$J(\Psi_a, \Psi_b) = J(\Psi_b, \Psi_a) \quad (14)$$

получаем

$$\frac{1}{k_b} f_{ab}(\vec{v}_a, -\vec{v}_b) = \frac{1}{k_a} f_{ba}(\vec{v}_b, -\vec{v}_a). \quad (15)$$

Это равенство дает связь между амплитудами рассеяния для неупругих ударов первого и второго рода.

Легко обобщить все эти рассуждения и на более сложные случаи, например, на столкновения, сопровождающиеся обменом, и т. п.

В общем случае можно утверждать, что принцип детального равновесия непосредственно следует из требования симметрии функционала (12) по отношению к перестановке волновых функций прямого и обратного процессов.

Обычно утверждают ⁽³⁾, что принцип детального равновесия следует из инвариантности уравнения Шредингера по отношению к замене ψ на $\bar{\psi}$ и t на $-t$. Однако это рассуждение неубедительно, так как волновая функция $\bar{\psi}(x, -t)$ вовсе не описывает обратного процесса и, как правило, вообще не имеет простого физического смысла ⁽⁴⁾ (например, сходящаяся сферическая волна). Равенство (11) было получено недавно в работе ⁽⁵⁾ строго, но довольно сложным способом. Формулы (11), (15) легко можно получить в рамках борновского приближения, однако в общем случае они, повидимому, никогда не выводились из квантовомеханического аппарата.

Из симметрии функционала (12) можно, помимо принципа детального равновесия, вывести еще одно весьма общее соотношение, если взять вместо функций Ψ_a, Ψ_b волновую функцию прямого и комплексно-сопряженную функцию обратного процесса. В этом случае, действуя точно таким же способом, мы получим для задачи о рассеянии частицы потенциальным полем вторую общую формулу для амплитуды рассеяния f :

$$\frac{1}{2i} [f(\vec{v}_2, \vec{v}_1) - \overline{f(\vec{v}_1, \vec{v}_2)}] = \frac{1}{4\pi} \int \overline{f(\vec{v}_1, \mathbf{n})} f(\vec{v}_2, \mathbf{n}) d\omega. \quad (16)$$

Это тождество должно выполняться при любой ориентации единичных векторов $\vec{v}_1, \vec{v}_2$. В случае, если возможны неупругие процессы, это же неравенство запишется в виде

$$\frac{1}{2i} \left[\frac{1}{k_a} f_{ab}(\vec{v}_1, \vec{v}_2) - \frac{1}{k_b} \overline{f_{ba}(\vec{v}_2, \vec{v}_1)} \right] = \sum_c \frac{1}{4\pi k_c} \int \overline{f_{bc}(\vec{v}_2, \mathbf{n})} f_{ac}(\vec{v}_1, \mathbf{n}) d\omega. \quad (17)$$

Здесь суммирование распространяется на все упругие и неупругие столкновения, которые возможны при данной полной энергии системы, а также на обменные процессы.

Пусть квантовомеханическая система состоит из двух частей, например, из двух сложных атомов. Состояние такой системы при отсутствии взаимодействия будет задано, если задать состояние каждого атома и его движение в пространстве. Обозначим состояние всей системы до столкновения A ; одно из возможных состояний после столкновения B . Переход из одного состояния в другое в результате столкновения характеризуется некоторым комплексным коэффициентом перехода f_{AB} . Вероятность перехода будет пропорциональна квадрату модуля коэффициента перехода

$$w_{AB} \sim |f_{AB}|^2. \quad (18)$$

Тогда, обобщая уравнения (11), (15), (16), (17) и отбрасывая весовые множители, можно написать

$$f_{AB} = f_{B^*A^*}; \quad (19)$$

$$\frac{1}{2i} (f_{AB} - \overline{f_{BA}}) = \sum_X \overline{f_{BX}} f_{AX}. \quad (20)$$

В уравнении (20) суммирование распространяется на все состояния системы с данной энергией.

Состояние A^* отличается от состояния A заменой полной волновой функции системы невзаимодействующих атомов на комплексно-сопряженную.

Из формулы (19) непосредственно получается

$$|f_{AB}| = |f_{B^*A^*}|, \quad w_{AB} = w_{B^*A^*}, \quad (21)$$

т. е. принцип детального равновесия, который широко используется в теории столкновений, в статистической физике и т. д. Уравнение (19) дает, кроме того, соотношение между фазами коэффициентов прямого и обратного переходов, однако это соотношение обычно не используется. Из уравнения (20) нельзя получить простого соотношения для вероятностей перехода. Поэтому уравнение (20) не имеет аналога в классической механике, так как там не имеет смысла понятие о комплексных коэффициентах перехода.

Для случая столкновения электронов с атомом из уравнения (17) при $a = b$ после разложения f_{ik} по полиномам Лежандра получается соотношение, связывающее амплитуды падающей и рассеянных волн. Это соотношение выражает сохранение числа частиц и может быть также получено из условия обращения в нуль полного тока через сферу, окружающую атом, для каждой из парциальных волн (*).

В общем случае уравнение (20) тесно связано с унитарностью оператора столкновения (?).

Ленинградский государственный университет
им. А. А. Жданова

Поступило
1 IV 1954

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ L. Hulthén, Kungl. Fys. Säll i Lund Förh., **14**, 2, Sweden (1944). ² W. Kohn, Phys. Rev., **74**, 1763 (1948). ³ Л. Ландау, Е. Лифшиц, Квантовая механика, 1948, гл. XV. ⁴ В. А. Фок, ДАН, **60**, 1157 (1948). ⁵ А. Я. Повзнер, Матем. сборн., **32**:1, 109 (1953). ⁶ Г. Ф. Друкарев, Вестн. ЛГУ, № 8, 161 (1953). ⁷ B. Lippman, J. Schwinger, Phys. Rev., **79**, 469 (1950).