ДОКЛАДЫ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

НОВАЯ СЕРИЯ

1954

Том XCVII, № 6

Доклады Академии Наук СССР
1954. Том XCVII, № 6

ФИЗИКА

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

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

имеющее при больших r асимптотический вид

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

Здесь $\vec{\nu}$ — 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 $|f(\vec{\nu}, \vec{\nu}')|^2$ определяет вероятность рассеяния частицы из направления $\vec{\nu}$ в направлении $\vec{\nu}'$.

Введем функционал

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

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

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

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

Выясним, какие следствия можно получить из условия

$$J(\varphi_1, \varphi_2) = J(\varphi_2, \varphi_1), \tag{5}$$

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

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

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 $e^{ik(\vec{\nu}\mathbf{r})}$ и функции $F_i(\mathbf{n})$ в ряд по сферическим функциям. Тогда

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

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

$$\int Y_l(\mathbf{n}) P_{l'}(\vec{\nu}\mathbf{n})\, d\omega = \frac{4\pi}{2l+1} Y_l(\vec{\nu})\, \delta_{ll'}. \tag{8}$$

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

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

или

$$F_1(-\vec{\nu}_2) = F_2(-\vec{\nu}_1). \tag{10}$$

Для точной амплитуды рассеяния f получаем

$$f(\vec{\nu}_1, -\vec{\nu}_2) = f(\vec{\nu}_2, -\vec{\nu}_1). \tag{11}$$

Уравнение (11) должно выполняться для любых $\vec{\nu}_1$ и $\vec{\nu}_2$. 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, $\vec{\nu}_a$, ψ_a, а после столкновения, соответственно, k_b, $\vec{\nu}_b$, ψ_b. Тогда принцип детального равновесия будет следовать из симметрии функционала

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

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

$$\begin{aligned} \Psi_a &\sim \bar{\psi}_a e^{ik_a \vec{\nu}_a \mathbf{r}} + \text{расходящиеся волны;} \\ \Psi_b &\sim \psi_b e^{ik_b \vec{\nu}_b \mathbf{r}} + \text{расходящиеся волны.} \end{aligned} \tag{13}$$

Из условия

$$J(\Psi_a, \Psi_b) = J(\Psi_b, \Psi_a) \tag{14}$$

получаем

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

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 $\overline{\psi}$ и t на $-t$. Однако это рассуждение неубедительно, так как волновая функция $\overline{\psi(x, -t)}$ 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:

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

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

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

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

$$w_{AB} \sim |f_{AB}|^2. \tag{18}$$

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

$$f_{AB} = f_{B^*A^*}; \tag{19}$$

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

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

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

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 [6].

В общем случае уравнение (20) тесно связано с унитарностью оператора столкновения [7].

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).