19

ДОКЛАДЫ

АКАДЕМИИ НАУК СССР

1961

Том 138, № 1

Доклады Академии наук СССР
1961. Том 138, № 1

ФИЗИКА

Ю. Н. ДЕМКОВ

ТЕОРЕМА ВИРИАЛА ДЛЯ КЛАССИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ О РАССЕЯНИИ ЧАСТИЦ СИЛОВЫМ ЦЕНТРОМ

(Представлено академиком В. А. Фоком 26 XII 1960)

Теорема вириала была доказана сначала в классической механике для финитных движений — таких, при которых координаты и импульсы материальных точек, составляющих систему, ограничены. В квантовой механике теорема была доказана еще в [1,2] для стационарных состояний дискретного спектра, т. е. для связаных состояний, что соответствует условию финитности в классической механике.

В. А. Фок показал [3], что наиболее естественный вывод теоремы вириала — это использование вариационного принципа и вариации масштаба длины. Соответствующие формулы были выведены для классической механики [4], для уравнения Шредингера [3], уравнения Дирака [3], в методе Томаса — Ферми [5] и т. д. Однако все эти доказательства относились к связанным состояниям или к финитным движениям. Для задач сплошного спектра оператора энергии в квантовой механике формула, аналогичная теореме вириала, была получена впервые автором [6] для задачи о рассеянии частиц силовым центром. В дальнейшем эта формула была обобщена на более сложные задачи теории столкновений — неупругие, обменные процессы и т. п. [7,8], на уравнение Дирака и на задачи квантовой теории поля [9]. Между тем в классической механике соответствующее обобщение до сих пор не было проведено.

Покажем на конкретном примере, как получить это обобщение. Сначала найдем общую формулу, из которой может быть получена теорема вириала для любой классической задачи. Исходим из вариационного принципа Гамильтона. Пусть

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L\,(q_1,\ldots,\ q_n;\ \dot{q}_1\ldots,\ \dot{q}_n;\ t)dt \tag{1}$$

функционал действия, зависящий от обобщенных координат $q_i\,(t)$, $i = 1,2,\ \ldots,\ n$. Тогда, предполагая, что $q_i\,(t)$ соответствуют реальному движению, имеем для вариации δS формулу

$$\delta S = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta q_i \Big|_{t_1}^{t_2}, \tag{2}$$

причем мы предполагаем, что вариации $\delta q_i\,(t)$ не обязательно обращаются в нуль на концах временного интервала.

Рассмотрим теперь частный случай вариаций

$$\delta q_i\,(t) = \varepsilon q_i\,(t), \tag{3}$$

где ε — бесконечно малый параметр. Будем называть такое преобразование вариацией масштаба. Подставляя (3) в формулы (1) и (2) и пренебрегая величинами, пропорциональными ε^2, получаем

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i \right) dt = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} q_i \Big|_{t_1}^{t_2}. \tag{4}$$

Применяя формулу (4) к различным системам и к различным типам движений, мы можем получить теорему вириала для каждого конкретного случая. Например, усредняя правую и левую части формулы по большому интервалу времени для финитных движений или по периоду для периодических движений, получаем в правой части нуль и приходим к обычной формулировке теоремы. Отметим при этом, что и левая и правая части равенства (4) существенно зависят от выбора обобщенных координат. Выбирая различные обобщенные координаты, мы будем получать, вообще говоря, различные формулировки.

Для инфинитных движений при $t_1 \to -\infty$ — или $t_2 \to +\infty$ обе части формулы (4) неограниченно возрастают, и это осложняет доказательство.

Рассмотрим задачу о рассеянии частицы с массой $m = 1$ сферически симметричным силовым центром. Функция Лангранжа имеет в этом случае вид

$$L = \frac{v^2}{2} - U(r). \tag{5}$$

Выбирая в качестве обобщенных декартовы координаты x, y, z, получаем из формулы (4)

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(v^2 - r\frac{dU}{dr} \right) dt = \mathbf{v} \cdot \mathbf{r} \Big|_{t_1}^{t_2}. \tag{6}$$

Пусть при $|t| \to \infty$ частица движется со скоростью v_∞. Предположим далее, что момент $t = 0$ соответствует минимальному значению $r = r_0$. Тогда движение симметрично относительно вектора $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(0)$ и при больших $|t|$ имеем

$$r = s + v_\infty |t|. \tag{7}$$

Отсюда видно, что обе части формулы (6) при $t_1 \to -\infty$, $t_2 \to +\infty$ содержат возрастающий член $v_\infty^2 (t_2 - t_1)$. Вычитая этот член и учитывая закон сохранения энергии

$$\frac{v^2}{2} + U = \frac{v_\infty^2}{2}, \tag{8}$$

имеем

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(2U + r\frac{dU}{dr} \right) dt = (v_\infty^2 t - \mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) \Big|_{t_1}^{t_2}. \tag{9}$$

Теперь можно перейти к пределу $t_1 \to -\infty$, $t_2 \to \infty$. Получаем

$$\int_{0}^{\infty} \left(2U + r\frac{dU}{dr} \right) dt = v_\infty \lim_{t \to \infty} (v_\infty t - r) = -v_\infty s. \tag{10}$$

Здесь мы учли симметрию движения, а также то, что $\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{v}_0 = 0$.

Таким образом, в левой части формулы (10) стоит выражение, характерное для теоремы вириала, а в правой части — величина s, имеющая простой геометрический смысл: она равна расстоянию, на которое уходит вперед частица при $t \to \infty$ по сравнению с точкой, начинающей двигаться в момент $t = 0$ из начала координат равномерно со скоростью v_∞ по прямой, догоняя рассеянную частицу. Однако правой части уравнения (10) можно придать и другой смысл, позволяющий провести сравнение с соответствующим квантовомеханическим выражением. Для этого представим ее в виде интеграла по r. Обозначим момент количества движения частицы через

$$M = r^2 \dot{\varphi} = \rho v_\infty, \tag{11}$$

где ρ — прицельное расстояние. Используя формулу (8), получаем

$$t(r) = \int_{r_0}^{r} \frac{dr}{\sqrt{v_\infty^2 - 2U - M^2 / r^2}} = \int_{r_0}^{r} \frac{dr}{v_r}, \tag{12}$$

где $r = r_0$ — значение, при котором $v_r [= \dot{r}(r)$ обращается в нуль. Отсюда получаем

$$\lim_{t\to\infty} [v_\infty t - r(t)] = \lim_{r\to\infty} [v_\infty t(r) - r] = \lim_{r\to\infty} \left(\int_{r_0}^{r} \frac{v_\infty}{v_r} dr - r \right). \tag{13}$$

Рассмотрим теперь выражение для фазы волновой функции в полуклассическом методе (см., например, ([10]), § 111)

$$\eta(v_\infty, M) = \lim_{r\to\infty} \left[\int_{r_0}^{r} \sqrt{v_\infty^2 - 2U - M^2 / r^2}\, dr - \int_{\rho}^{r} \sqrt{v_\infty^2 - M^2 / r^2}\, dr \right]. \tag{14}$$

Второй интеграл легко может быть вычислен при больших r. Получаем

$$\eta(v_\infty, M) = \lim_{r\to\infty} \left(\int_{r_0}^{r} v_r dr - v_\infty r + M \frac{\pi}{2} \right). \tag{15}$$

Сравнивая это выражение с формулой (13), легко заметить, что

$$\lim_{t\to\infty} [v_\infty t - r] = \frac{\partial \eta}{\partial v_\infty}. \tag{16}$$

Отметим, что, хотя r_0 и зависит от v_∞, однако при дифференцировании учитывать эту зависимость не нужно, так как в формуле (15) функция v_r под интегралом обращается в нуль на нижнем пределе. Таким образом, получаем окончательно

$$\int_0^\infty \left(2U + r \frac{dU}{dr}\right) dt = v_\infty \frac{\partial \eta}{\partial v_\infty}. \tag{17}$$

Эту формулу можно сравнить с соответствующим равенством в квантовой механике ([6-8])

$$2 \int_0^\infty \left(2U + r \frac{dU}{dr}\right) \psi_l^2(r)\, dr = v_\infty^2 \frac{d\eta_l}{dv_\infty}. \tag{18}$$

Здесь ψ_l — радиальная функция l-й парциальной волны, имеющая асимптотический вид

$$\psi_l \sim \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l\right), \tag{19}$$

а η_l — фаза этой радиальной функции. Постоянную Планка $\hbar$ мы положили здесь равной единице, тогда азимутальное квантовое число l совпадает при больших l с M.

Переход от квантовой формулы (18) к классической формуле (17) можно проследить, если подставить вместо $\psi_l(r)$ в формуле (18) полуклассическую функцию

$$\psi_M(r) = \sqrt{\frac{v_\infty}{v_r}} \sin\left(\int_{r_0}^{r} v_r dr + \frac{\pi}{4} \right), \tag{20}$$

фаза которой совпадает с фазой в формуле (15). Предполагая теперь, что при $r < r_0$ функция убывает настолько быстро, что ее можно положить равной нулю, а при $r > r_0$ настолько быстро осциллирует, что можно положить

$$\psi_M^2 = \frac{1}{2} \frac{v_\infty}{v_r}, \tag{21}$$

мы и приходим к искомой связи между обеими формулами.

Для стационарных связанных состояний с энергией E и с радиальной волновой функцией ψ_E имеем аналогичную формулу

$$\int_0^\infty \left(2U + r\frac{dU}{dr}\right)\psi_E^2 dr = 2E, \tag{22}$$

и, наконец, для финитных движений в классической механике

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(2U - 2E + r\frac{dU}{dr}\right) dt = 0, \tag{23}$$

где интегрирование можно производить, например, между двумя моментами времени, когда $\mathbf{r}$ и $\mathbf{v}$ ортогональны (моменты наибольшего и наименьшего удаления точки от силового центра).

Отметим в заключение, что угол отклонения частицы при рассеянии θ и дифференциальное эффективное сечение σ тоже просто выражаются через производные от полуклассической фазы ([11])

$$\theta = 2\frac{\partial\eta}{\partial M}; \qquad \sigma = \frac{M}{2v_\infty^2}\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial M^2}\right)^{-1}. \tag{24}$$

Для более сложных задач, например для системы взаимодействующих частиц, доказательство теоремы усложняется, ибо при $|t| \to \infty$ функция Лагранжа, вообще говоря, не стремится к постоянной величине. В этом случае нужно рассматривать разность между полной функцией Лагранжа L и предельной L_- — при $t \to -\infty$ или L_+ — при $t \to \infty$, в которых не учитывается взаимодействие систем частиц, расходящихся друг от друга.

Любопытно отметить, что в квантовой механике данная теорема была доказана раньше, чем в классической механике, — случай, по-видимому, исключительный.

Ленинградский годсударственный университет
им. А. А. Жданова

Поступило
8 XII 1960

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, Zs. f. Phys., **35**, 557 (1926). [2] B. N. Finkelstein, Zs. f. Phys., **50**, 293 (1928). [3] V. Fock, Zs. f. Phys., **63**, 855 (1930). [4] V. Fock, J. Krutkow, Sow. Phys., **1**, 756 (1932). [5] В. А. Фок, Sow. Phys., **1**, 747 (1932). [6] Ю. Н. Демков, ДАН, 89, 249 (1953). [7] Ю. Н. Демков, Вариационные принципы в теории столкновений, М., 1958. [8] Ю. Н. Демков, Вестн. ЛГУ, № 22 (1958). [9] Ю. В. Новожилов, Вестн. ЛГУ, № 4, 5 (1957). [10] Л. Ландау, Е. Лифшиц, Квантовая механика, ч. 1, М.— Л., 1948. [11] Н. Мотт, Г. Месси, Теория атомных столкновений, ИЛ, 1951.