получаем

$$f(0,\ k)=f_B+\frac{1}{i\pi}P\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{f(0,\ k')\,dk'}{k'-k}-2\sum_{n,\ l}\frac{\operatorname{Res} f(0,\ k_{nl})}{k_{nl}-k}. \qquad (97,16)$$

В этом соотношении k считается действительным, а индекс нуль мы опустили. Точки $k=k_{nl}$ лежат на верхней мнимой полуоси и отвечают полюсам функций $S_l(k)$. Суммирование в (97,16) проводится по всем связанным состояниям. Выражение для вычета функции S_l через амплитуду соответствующего связанного состояния дается формулой (97,10). Учитывая (97,13), имеем

$$\operatorname{Res} f(0,\ k_{nl})=\frac{1}{2k_{nl}}A_{nl}^2(-1)^{l+1}(2l+1). \qquad (97,17)$$

Соотношение (97,16) можно переписать в несколько ином виде, если учесть, что согласно (97,3) и (97,4) при действительном k $S_l(-k)=S_l^*(k)$ и соответственно [см. (97,13)] $f(0,-k)=f^*(0,k)$. Поэтому интегрирование в (97,16) может быть проведено только по имеющим физический смысл положительным значениям k. Приравнивая в (97,16) слева и справа действительные части, окончательно имеем

$$\operatorname{Re} f(0,\ k)=f_B+\frac{2}{\pi}P\int\limits_0^{\infty}\frac{\operatorname{Im} f(0,\ k')\,k'\,dk'}{k'^2-k^2}-\operatorname{Re}\sum_{n,\ l}\frac{A_{nl}^2(-1)^{l+1}(2l+1)}{k_{nl}(k_{nl}-k)}. \qquad (97,18)$$

Входящая в правую часть равенства мнимая часть амплитуды $\operatorname{Im} f(0,k)$ может быть выражена согласно оптической теореме [см. (91,11)] через физически наблюдаемую величину — полное сечение рассеяния $\sigma(k)$. Поэтому и действительная часть $\operatorname{Re} f(0,k)$ согласно (97,18) может быть выражена через физически наблюдаемые величины. Дисперсионные соотношения находят в настоящее время широкую область применения. В частности, с их помощью можно сразу устранить отмеченную в § 95 неоднозначность выбора фаз при известном законе рассеяния, т. е. при известном эффективном сечении. Подчеркнем, что дисперсионные соотношения основаны на таком общем свойстве матрицы рассеяния, как ее аналитичность, вытекающем из принципа причинности.

§ 98. Обращение времени и принцип детального равновесия

Рассмотрим свойства S-матрицы, связанные с симметрией уравнения Шредингера по отношению к обращению времени. Мы уже касались этого вопроса в § 6 и сейчас рассмотрим его более подробно.

Симметрия по отношению к обращению времени означает, что существует решение $\psi_{\text{обр}}(x, t)$ «обращенного» уравнения Шредингера, выражающееся через функцию $\psi(x, -t)$.

Если оператор $\hat{H}$ не зависит от времени явно, то

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, -t)}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^*(x, -t). \tag{98,1}$$

При $\hat{H}^* = \hat{H}$ уравнение (98,1) совпадает с исходным уравнением (27,7), а функция $\psi^*(x, -t)$ описывает процесс, обращенный во времени [см. (6.9)]. В более общем случае (например, заряженная частица в магнитном поле) мы должны положить

$$\psi_{\text{обр}}(x, t) = \hat{V} \psi^*(x, -t), \tag{98,2}$$

где $\hat{V}$ — некоторый оператор. Действуя на уравнение (98,1) слева оператором $\hat{V}$, получим уравнение для функции $\psi_{\text{обр}}$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\text{обр}}(x, t)}{\partial t} = \hat{V} \hat{H}^* \hat{V}^{-1} \psi_{\text{обр}}(x, t). \tag{98,3}$$

Это уравнение совпадает с исходным уравнением Шредингера (27,7) при условии

$$\hat{V} \hat{H}^* = \hat{H} \hat{V}. \tag{98,4}$$

Из эрмитовости оператора $\hat{H}$ следует, что оператор $\hat{V}$ должен быть унитарным, т. е. $\hat{V}^{-1} = \hat{V}^+$. Закону преобразования волновых функций (98,2) отвечает определенный закон преобразования и произвольных операторов $\hat{F}$. Этот закон может быть найден обычными методами (см. § 46, 48, 49).

Некоторая специфика в данном случае возникает лишь в связи с тем, что оператор $\hat{V}$ действует не на функцию ψ, а на функцию ψ^*. Оператор $\hat{F}_{\text{обр}}$ (обращенный во времени) мы найдем, исходя из требования, что матричный элемент оператора $\hat{F}$, взятый по функциям $\psi_{\text{обр}}$, должен совпадать с матричным элементом оператора $\hat{F}_{\text{обр}}$, взятым по функциям $\psi(x, -t)$:

$$\langle \psi_{\text{обр}} | \hat{F} | \psi_{\text{обр}} \rangle = \langle \psi(-t) | \hat{F}_{\text{обр}} | \psi(-t) \rangle. \tag{98,5}$$

Используя соотношение (98,2), получаем

$$\langle \psi_{\text{обр}} | \hat{F} | \psi_{\text{обр}} \rangle = \langle \hat{V} \psi^*(-t) | \hat{F} | \hat{V} \psi^*(-t) \rangle = \langle \psi^*(-t) | \hat{V}^+ \hat{F} \hat{V} | \psi^*(-t) \rangle.$$

Отсюда следует [см. (17,3)]

$$\tilde{\hat{F}}_{\text{обр}} = \hat{V}^+ \hat{F} \hat{V}, \tag{98,6}$$

где через $\tilde{\hat{F}}_{\text{обр}}$ обозначен оператор, транспонированный к оператору $\hat{F}_{\text{обр}}$. Как легко видеть из (98,4) и (98,6), оператор $\hat{H}$

инвариантен по отношению к обращению времени, т. е. $\hat{H}_{обр}=\hat{H}$. При этом мы использовали условие эрмитовости гамильтониана $\tilde{\hat{H}}=\hat{H}^*$. Соотношение (98,6) может служить основой для нахождения оператора $\hat{V}$. Действительно, естественно потребовать, чтобы квантовые операторы при обращении времени преобразовывались бы так же, как и соответствующие классические величины. Такие величины, как энергия, координата, напряженность электрического поля и т. д. инвариантны по отношению к обращению времени. Инвариантны должны быть и соответствующие операторы. Скорость, импульс, момент количества движения, напряженность магнитного поля и т. д. изменяют знак при обращении времени. Таким же свойством должны обладать и соответствующие операторы. Например, должны выполняться соотношения

$$\hat{\boldsymbol{r}}_{обр}=\hat{\boldsymbol{r}}, \qquad \hat{\boldsymbol{p}}_{обр}=-\hat{\boldsymbol{p}}, \qquad \hat{\boldsymbol{L}}_{обр}=-\hat{\boldsymbol{L}}. \tag{98,7}$$

Спин преобразуется как момент количества движения, т. е. должно выполняться соотношение

$$\hat{\boldsymbol{s}}_{обр}=-\hat{\boldsymbol{s}}. \tag{98,8}$$

Рассмотрим, например, частицу со спином $^1/_2$. Исходя из соотношений (98,8), легко найти оператор $\hat{V}_s$, воздействующий на спиновые переменные при обращении времени. Используя выражения (98,6) и учитывая вид операторов спина (60,15), (60,16), имеем

$$\left.\begin{aligned} \hat{V}_s^+\hat{s}_x\hat{V}_s&=-\hat{s}_x,\\ \hat{V}_s^+\hat{s}_y\hat{V}_s&=\hat{s}_y,\\ \hat{V}_s^+\hat{s}_z\hat{V}_s&=-\hat{s}_z. \end{aligned}\right\} \tag{98,9}$$

Из этих соотношений с помощью (60,12) легко находим

$$\hat{V}_s=i\sigma_y. \tag{98.10}$$

(Мы выбрали фазовый множитель так, чтобы оператор $\hat{V}_s$ был действителен.) При движении частицы в магнитном поле оператор $\hat{V}$ должен включать в себя оператор, изменяющий направление магнитного поля (или векторного потенциала $\boldsymbol{A}$) на обратное. С учетом этого обстоятельства соотношение (98,4) имеет вид

$$\sigma_y\hat{H}^*(-\boldsymbol{A})=\hat{H}(\boldsymbol{A})\sigma_y. \tag{98,11}$$

Легко проверить, что гамильтониан $\hat{H}$ [см. (63,3)] удовлетворяет этому соотношению. Инвариантность уравнения Шредингера по отношению к обращению времени означает, что всегда можно найти оператор $\hat{V}$, удовлетворяющий условию (98,4) [см. подробнее [1])]. Однако открытые в 1964 г. аномалии при распаде K-мезонов показывают, что, по-видимому, при определенных условиях принцип обратимости времени может нарушаться.

Из инвариантности гамильтониана $\hat{H}$ по отношению к замене $t \to -t$ следует инвариантность S-матрицы, т. е. [см. (98,6)] выполняется соотношением

$$\hat{V}^{+}\hat{S}\hat{V} = \tilde{\tilde{S}}. \qquad (98.12)$$

Справедливость этого соотношения легко проверяется, с учетом (98,4), для оператора $\hat{V}(t, t_0)$ [см. (96,5)]. Так как оператор $\hat{S}$ определяется как предел оператора $\hat{V}(t, t_0)$ [см. (96,11)], то он также удовлетворяет соотношению (98,12).

Основываясь на соотношении (98,12), не представляет труда установить связь непосредственно между матричными элементами S-матрицы для прямых и обратных реакций. Обозначим через ψ_a и ψ_b волновые функции начального и конечного состояния системы. Тогда, учитывая (17,3), (98,2) и (98,12), имеем

$$\langle\psi_b\,|\,\hat{S}\,|\,\psi_a\rangle = \langle\psi_a^*\,|\,\tilde{\tilde{S}}\,|\,\psi_b^*\rangle = \langle\psi_a^*\,|\,\hat{V}^{+}\hat{S}\hat{V}\,|\,\psi_b^*\rangle =$$
$$= \langle\hat{V}\psi_a^*\,|\,\hat{S}\,|\,\hat{V}\psi_b^*\rangle = \langle\psi_{a^*}\,|\,\hat{S}\,|\,\psi_{b^*}\rangle, \qquad (98,13)$$

где через ψ_{a^*} и ψ_{b^*} обозначены «обращенные» волновые функции состояний a и b. Таким образом, выполняется равенство

$$S_{ba} = S_{a^*b^*}. \qquad (98,14)$$

Соотношение (98,14) устанавливает связь между матричными элементами S-матрицы прямого и «обращенного» процесса. Состояния ψ_{a^*}, ψ_{b^*} отличаются от состояний ψ_a, ψ_b знаком таких величин, как скорости, импульсы, проекции момента количества движения, спина и т. д. Соотношение (98,14), или эквивалентное ему соотношение (98,13) носит название теоремы взаимности. На основании этой теоремы может быть установлена связь между сечениями прямых и обратных реакций (принцип детального равновесия).

Рассмотрим реакцию

$$a + A \rightleftarrows b + B.$$

Обозначим через j_a, m_a, j_A, m_A, j_b, m_b, j_B, m_B полные моменты и их проекции частиц, участвующих в реакции. Сечения прямой и обратной реакции, выраженные через матричные

---

[1]) А. М. Балдин, В. И. Гольданский, И. Л. Розенталь, Кинетика ядерных реакций, Физматгиз, 1959.

элементы S-матрицы, согласно (95,14) имеют вид

$$\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b}=\frac{4\pi^2}{k_a^2}|\langle j_b,\ m_b,\ j_B,\ m_B;\ -\boldsymbol{n}_b|\hat{S}|\,j_a,\ m_a,\ j_A,\ m_A;\ \boldsymbol{n}_a\rangle|^2, \quad (98,15)$$

$$\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}=\frac{4\pi^2}{k_b^2}|\langle j_a,\ m_a,\ j_A,\ m_A;\ -\boldsymbol{n}_a|\hat{S}|\,j_b,\ m_b,\ j_B,\ m_B;\ \boldsymbol{n}_b\rangle|^2. \quad (98,16)$$

Так как вектор импульса относительного движения частиц в конечном состоянии направлен от центра тяжести, ему приписан знак минус.

Непосредственно написать связь между этими сечениями нельзя, так как теорема взаимности связывает сечение прямого процесса и «обращенного», отличающегося от (98,16) изменением знаков проекций моментов m_a, m_A, m_b, m_B на обратные. Можно, однако, написать связь между усредненными сечениями, т. е. сечениями, просуммированными по проекциям моментов конечных состояний и усредненными по проекциям моментов начальных состояний. Такие сечения уже не зависят от проекций моментов и для них теорема взаимности (98,14) дает

$$\frac{1}{k_b^2}(2j_a+1)(2j_A+1)\frac{\overline{d\sigma}_{ba}}{d\Omega_b}=\frac{1}{k_a^2}(2j_B+1)(2j_b+1)\frac{\overline{d\sigma}_{ab}}{d\Omega_a}, \quad (98,17)$$

где

$$\frac{\overline{d\sigma}_{ba}}{d\Omega_b}=\frac{1}{(2j_a+1)(2j_A+1)}\sum_{\substack{m_a,\,m_A\\ m_b,\,m_B}}\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b} \quad (98,18)$$

и

$$\frac{\overline{d\sigma}_{ab}}{d\Omega_a}=\frac{1}{(2j_b+1)(2j_B+1)}\sum_{\substack{m_a,\,m_A\\ m_b,\,m_B}}\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}. \quad (98,19)$$

Соотношение, аналогичное (98,17), можно написать и для полных сечений

$$k_a^2(2j_a+1)(2j_A+1)\overline{\sigma}_{ba}=k_b^2(2j_b+1)(2j_B+1)\overline{\sigma}_{ab}. \quad (98,20)$$

Отметим, что в рамках применимости теории возмущений можно установить связь и между неусредненными сечениями прямых и обратных реакций

$$\frac{1}{k_b^2}\frac{d\sigma_{ba}}{d\Omega_b}=\frac{1}{k_a^2}\frac{d\sigma_{ab}}{d\Omega_a}. \quad (98,21)$$

Действительно, в этом случае вероятность перехода, а следовательно, и эффективное сечение процесса определяются квадратом модуля матричного элемента гамильтониана возмущения H'_{ba}, для которого в силу эрмитовости выполняется соотношение $|H'_{ba}|^2=|H'_{ab}|^2$. Из этого равенства следует соотношение (98,21).