3.2 Srážkový člen

3.2.1 Binární srážky

Metodou řetězce BBGKY jsme nalezli srážkový člen Boltzmannovy rovnice (3.23) ve tvaru

$$\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}} = (N-1)\int [\Phi_{1,2}, f_2]\, d^3x_2 d^3p_2 \; . \tag{3.101}$$

Předpokládejme, že binární interakční potenciál $\Phi_{1,2} = \Phi(|r|)$, kde $r = x_2 - x_1$ je vzájemná vzdálenost částic, a že $\Phi(|r|) = 0$ pro $r > R$, tj. vně jistého malého poloměru interakce. Vně tohoto poloměru můžeme očekávat náhodné, vzájemně nekorelované rozdělení částic,

$$f_2(x_1, p_1, x_2, p_2) = f_1(x_1, p_1) f_1(x_2, p_2) \; . \tag{3.102}$$

Naproti tomu pro menší vzdálenosti může Φ divergovat, a potom f_2 musí klesat k nule, což odpovídá skutečnosti, že částice se k sobě nemohou v důsledku své interakce neomezeně přiblížit. Abychom mohli podle (3.101) vyčíslit srážkový člen, musíme nalézt (anti-)korelaci částic v malých vzdálenostech. Předpokládejme, že dvojčásticová rozdělovací funkce je časově nezávislá, prostorově závislá pouze na r, a že její ovlivnění dalšími částicemi je (alespoň během binární srážky) zanedbatelné. Dostáváme tak pro ni další rovnici (3.24) v explicitním tvaru

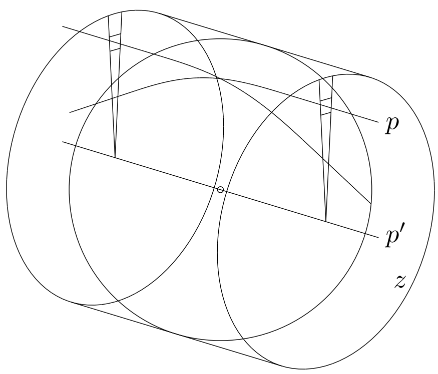
$$[H_2, f_2] \equiv \left[\frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + \Phi(r), f_2\right] = [\Phi(r), f_2] + \frac{p_1^i - p_2^i}{m}\frac{\partial f_2}{\partial r^i} = 0. \tag{3.103}$$

Odtud můžeme vyjádřit $[\Phi(r), f_2]$ a po dosazení do (3.101) dostáváme

$$\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}} = (N-1)\int \frac{p_2^i - p_1^i}{m}\int \frac{\partial f_2}{\partial r^i} d^3r d^3p_2 \; . \tag{3.104}$$

Vnitřní integrál gradientu dvojčásticové rozdělovací funkce přechází na integrál této funkce přes plochu kolmou ke směru $p_2^i - p_1^i$, tj. ve válcových souřadnicích b, φ, z (b je srážkový parametr)

$$\int \frac{\partial f_2}{\partial r^i} d^3r = \int [f_2]_{z=-Z}^{z=+Z} b\,db\,d\varphi \; , \tag{3.105}$$



Obrázek 3.3: Geometrie binární srážky.

kde $Z \geq R$ je poloviční výška válce obsahující sféru binární interakce (přitom však stále podstatně menší než jsou prostorové nehomogenity vyjádřené závislostí $f_1(x)$). V $z = -Z$ je podle předpokladu (3.102) dvojčásticová rozdělovací funkce vyjadřující hustotu vzájemně proti sobě nalétávajících částic dána součinem lokálních (na prostorové škále $b \leq R$ homogenních) jednočásticových funkcí. Naproti tomu v $z = +Z$ je hustota vylétávajících částic $f_2(b)$ obecně nehomogenní. Protože proces srážky dvou částic vyšetřujeme jako pohyb (neovlivněný interakcí s dalšími částicemi) ve dvoučásticovém fázovém prostoru, f_2 je konstantní podél příslušné fázové trajektorie, takže

$$f_2(b, z = +Z, p_2 - p_1) = f_2(r > R, p_2' - p_1') = f_1(p_1')f_1(p_2') \;, \tag{3.106}$$

kde $p_{1,2}'$ jsou hybnosti které musí mít nalétávající částice aby se po srážce dostaly do směrů $p_{1,2}$ a srážkového parametru b (vzhledem k časové reverzibilitě[15] tak jde o vyšetřování diferenciálního účinného průřezu $d\sigma = 2\pi b db$ rozptylu $-p_{1,2} \to -p_{1,2}'$). Po dosazení do (3.104) tak dostáváme srážkový člen ve tvaru

$$\left(\frac{\delta f}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}} = (N-1)\int \frac{p_2^i - p_1^i}{m} \int \left(f_1(p_1')f_1(p_2') - f_1(p_1)f_1(p_2)\right) 2\pi b db d^3p_2 \;. \tag{3.107}$$

Tento výraz obsahuje relativní rychlost $\frac{p_2 - p_1}{m}$ částic vynásobenou diferenciálním účinným průřezem, čili, v souhlase s představou znázorněnou v obr. 3.1–b, pravděpodobnost procesu srážek, při nichž částice odejdou z fázového elementu určeného $p_{1,2}$ do $p_{1,2}'$ nebo naopak. Tento výsledek může být zobecněn i pro kvantové procesy a různé počty interagujících částic (např. pro rozpady částic na částice jiných druhů), kdy mechanická analogie dvojčásticové srážky je neplatná.

3.2.2 Obecný tvar

Srážkový člen na pravé straně Boltzmannovy rovnice (3.25) pro jednočásticovou rozdělovací funkci částic typu A udává celkovou fázovou hustotu pravděpodobnosti vzniku (nebo negativní hodnota zániku) těchto částic interakcí s ostatními částicemi téhož nebo jiného druhu. Proto jej můžeme vyjádřit jako součet kladných příspěvků od jednotlivých elementárních procesů, při nichž dochází ke vzniku takovéto částice ve sledovaném elementu fázového prostoru, a záporných příspěvků od procesů, při nichž částice zaniká. To znamená, že například rozptyl, což je přechod částice z jednoho bodu v prostoru hybností do druhého, chápeme jako zánik částice v původním a vznik v novém elementu fázového prostoru. Uvažujme tedy obecnou ('chemickou') reakci mezi částicemi $X_B|_{B=1}^M$, při níž vznikají částice $X_B|_{B=M+1}^N$

$$\sum_{B=1}^{M} X_B \rightleftharpoons \sum_{B=M+1}^{N} X_B \;. \tag{3.108}$$

Pokud všechna X_B můžeme považovat za nekvantové částice (tj. jestliže můžeme zanedbat stimulovanou emisi pro bosony a vylučovací princip pro fermiony, což lze vždy, když jsou rozdělovací funkce zanedbatelné vůči fázové hustotě ϕ_B elementárních kvantových stavů), pak příspěvek reakce

[15] Bezesrážková Boltzmannova rovnice pro N-částicovou rozdělovací funkci je časově reverzibilní. Binární interakce původně nekorelovaných nalétávajících částic způsobuje korelaci mezi vylétávajícími částicemi, kterou by bylo třeba si 'zapamatovat', aby byl celý systém stále vratný. Přiblížením dvojčásticové rozdělovací funkce vylétávajících částic opět nekorelovaným rozdělením v jiném elementu dvojčásticového fázového prostoru předpokládáme, že srážková korelace je vlivem dalšího vývoje 'zapomenuta' a proto takto odvozená jednočásticová Boltzmannova rovnice s pravou stranou se stává časově ireverzibilní.

(3.108) ke srážkovému členu částice X_A bude

$$\left(\frac{\delta f_A}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}}(p_A) = \sum_{C, X_C \equiv X_A} \nu_C \int \left[P(p_1, ..., p_N) \prod_{B=1}^{M} f_B(p_B)\right]_{p_C = p_A} \prod_{B=1, B\neq C}^{N} d^3 p_B \ , \qquad (3.109)$$

kde 'stechiometrické koeficienty' $\nu_C = +1$ pro částice vznikající ($C > M$) a $\nu_C = -1$ pro částice zanikající ($C \leq M$). $P(p_1, ..., p_N)$ je pravděpodobnost proběhnutí reakce (3.108) za jednotku času mezi částicemi s počátečními hybnostmi $p_1, ..., p_M$ do koncových hybností $p_{M+1}, ..., p_N$. Srážkový člen na pravé straně Boltzmannovy rovnice je tedy (na rozdíl od levé strany) obecně nelineární v rozdělovací funkci částic.

Jestliže rozdělovací funkce některé ze vznikajících částic (např. X_C) není zanedbatelná vůči ϕ_C můžeme do výrazu (3.109) 'zabudovat' bosonové nebo fermionové chování této částice přidáním do integrandu na pravé straně členu (jakési 'modifikované' rozdělovací funkce[16])

$$\hat{f}_C \equiv 1 \pm \frac{f_C}{\phi_C} \ , \qquad (3.110)$$

kde horní znaménko (+) platí pro bosony (a člen udává zvýšení pravděpodobnosti reakce (3.108) v důsledku stimulované emise) a dolní znaménko (−) pro fermiony (a člen pak udává snížení pravděpodobnosti reakce vlivem Pauliho vylučovacího principu). Takto zobecněný výraz (3.109) však můžeme formálně považovat za příspěvek reakce

$$X'_C + \sum_{B=1}^{M} X_B \rightleftharpoons \sum_{B=M+1}^{N} X_B + X''_C \ , \qquad (3.111)$$

jejíž pravděpodobnost

$$P(p'_C, p_1, ..., p_N, p''_C) = \pm\phi_C^{-1} P(p_1, ..., p_N)\delta(p'_C - p_C)\delta(p''_C - p_C) \ , \qquad (3.112)$$

takže výraz (3.109) lze brát jako obecný tvar srážkového členu.

3.2.3 Momentový rozvoj

K řešení Boltzmannovy rovnice metodou rozvoje do zobecněných momentů ve tvaru (3.75) potřebujeme rozvinout i srážkový člen

$$| \left(\frac{\delta f_A}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}} \rangle = \left(\frac{\delta f_A}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}}^{\alpha} |\alpha\rangle \qquad (3.113)$$

a jeho momenty vyjádřit pomocí momentů rozdělovacích funkcí částic účastnících se srážky. Podle (3.109) jsou momenty srážkového členu dány integrálem pravděpodobnosti $P(p_1, ..., p_N)$ reakce (3.108) přes všechny hybnosti

$$\left(\frac{\delta f_A}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}}^{\alpha} = \langle\alpha| \left(\frac{\delta f_A}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}} \rangle = \sum_{C, X_C \equiv X_A} \nu_C \int \langle\alpha(p_C)|P(p_1, ..., p_N) \prod_{B=1}^{M} f_B(p_B) \prod_{B=1}^{N} d^3 p_B \ . \qquad (3.114)$$

Tuto pravděpodobnost můžeme považovat za integrační jádro operátoru

$$\tilde{P} = |\alpha_{M+1}, ..., \alpha_N\rangle P_{\alpha_1, ..., \alpha_M}^{\alpha_{M+1}, ..., \alpha_N} \langle\alpha_1, ..., \alpha_M| \ , \qquad (3.115)$$

[16] Zde je zřejmá výhodnost volby elementárního kvantového stavu za jednotku fázového objemu, kdy $\phi_C \equiv 1$.

přiřazujícího jistému rozdělení $f(p_1,...,p_M)=\prod_{B=1}^{M} f_B(p_B)$ částic vstupujících do reakce (3.108) rozdělení $f(p_{M+1},...,p_N)$ částic vystupujících (báze těchto součinových prostorů jsou tvořeny součiny bázových prvků v jednočásticových prostorech). Dosazením příslušných rozvojů (3.75) do (3.114) dostaneme moment srážkového členu ve tvaru multilineární kombinace momentů rozdělovacích funkcí částic do reakce (3.108) vstupujících

$$\left(\frac{\delta f_A}{\delta t}\right)_{\mathrm{c}}^{\alpha} = \sum_{\alpha_1,\dots,\alpha_M} P_{A\;\alpha_1,\dots,\alpha_M}^{\;\alpha} \prod_{B=1}^{M} f_B{}^{\alpha_B} \;, \tag{3.116}$$

kde koeficienty $P_{A\;\alpha_1,\dots,\alpha_M}^{\;\alpha}$ jsou dány maticovými elementy $P_{\alpha_1,\dots,\alpha_M}^{\alpha_{M+1},\dots,\alpha_N}$ operátoru $\tilde{P}$

$$\begin{aligned} P_{A\;\alpha_1,\dots,\alpha_M}^{\;\alpha} \;&=\; + \sum_{C=M+1, X_C\equiv X_A}^{N} \delta_{\alpha_C}^{\alpha} P_{\alpha_1,\dots,\alpha_M}^{\alpha_{M+1},\dots,\alpha_N} \prod_{B=M+1, B\neq C}^{N} \langle 1|\alpha_B\rangle \\ &\quad - \sum_{C=1, X_C\equiv X_A}^{M} Q_{\alpha_C}^{\alpha\beta_C} P_{\alpha_1,\dots,\beta_C,\dots,\alpha_M}^{\alpha_{M+1},\dots,\alpha_N} \prod_{B=M+1}^{N} \langle 1|\alpha_B\rangle \;, \end{aligned} \tag{3.117}$$

kde

$$Q_{\alpha_C}^{\alpha\beta_C} = \langle \beta_C | (\langle \alpha(p)|) | \alpha_C \rangle \;. \tag{3.118}$$

Koeficient $\langle 1|\alpha\rangle \equiv \int 1|\alpha\rangle$ je zpravidla δ_α^0 (jestliže jednička je základním členem ortonormální báze funkcí), takže kladné členy v tomto součtu přes C, tj. členy pro částici X_C vystupující ($C>M$), jsou přímo rovné některým maticovým elementům. Záporné členy (pro částice vstupující, $C\leq M$) jsou naproti tomu zpravidla lineární kombinací více maticových elementů, protože v integrálu (3.114) se k jednomu ket-vektoru (v f_C) vyskytují dva bra-vektory (v P a $\langle\alpha|$), jejichž součin je nutné nejprve pomocí koeficientů Q rozložit na součet jednotlivých bra-vektorů.

Přímočarý výpočet koeficientů $P_{A\;\alpha_1,\dots,\alpha_M}^{\;\alpha}$ nebo $P_{\alpha_1,\dots,\alpha_M}^{\alpha_{M+1},\dots,\alpha_N}$ by byl značně obtížný, protože vyžaduje trojnásobnou integraci přes hybnost každé z N částic. Přitom počet těchto koeficientů roste alespoň s $M+1$. resp. N-tou mocninou počtu uvažovaných momentů rozdělovací funkce. Řada z těchto koeficientů však vypadne a zbylé lze zjednodušit díky symetriím srážky. Je například zřejmé, že pro identické vstupující nebo vystupující částice musí tyto koeficienty být symetrické vůči záměně příslušných indexů. Jestliže P závisí pouze na relativní orientaci hybností částic účastnících se srážky (tj. srážka není anizotropní např. v důsledku vnějšího elektromagnetického pole), pak musí být shodné koeficienty lišící se pouze prohozením prostorových os. Další symetrie koeficientů musí vyplývat ze zákonů zachování hybnosti, popřípadě energie (pro pružnou srážku). Nechť, obecně, $P(p_1,...,p_N)$ je invariantní vůči jisté grupě transformací

$$p \to p' = p'(p,\xi) \tag{3.119}$$

parametrizované parametrem ξ. Báze $\{|\alpha\rangle\}$ rozvoje (3.75) indukuje jistou reprezentaci T_ξ této grupy

$$|\alpha'(p')\rangle = T_\xi{}^{\alpha}{}_{\alpha'} |\alpha(p)\rangle \;, \tag{3.120}$$

která určuje transformační vztahy pro maticové elementy $P^{\alpha}{}_{\beta}$

$$P'{}_{\alpha'}{}^{\beta'} = (T_\xi^{-1})^{\alpha'}{}_{\alpha} P^{\alpha}{}_{\beta} T_\xi{}^{\beta}{}_{\beta'} \;. \tag{3.121}$$

V důsledku invariance $P(p_1,...,p_N)$ vůči (3.119) tedy musí maticové elementy vyhovovat homogenním lineárním rovnicím

$$\left[(T_\xi^{-1})^{\alpha'}{}_{\alpha} T_\xi{}^{\beta}{}_{\beta'} - \delta^{\alpha'}{}_{\alpha}\delta^{\beta}{}_{\beta'}\right] P^{\alpha}{}_{\beta} = 0 \;, \tag{3.122}$$

z nichž můžeme některé elementy vyjádřit jako lineární kombinace jiných. Protože v praxi může být i řešení těchto rovnic obtížné, je výhodnější využívat symetrií P přecházením k takovým bázím v prostorech hybností, v nichž se maticové elementy zjednoduší (např. se stanou diagonální).

Rozvoj pro binární srážku. Jako příklad uveďme výpočet rozvoje srážkového členu do prostorových Hermiteových polynomů $|\vec{\alpha}\rangle = \Pi_{i=1}^{3} P_{\alpha_i}(p_i)$ pro binární srážku

$$X_1 + X_2 \rightleftharpoons X_1' + X_2' \; . \tag{3.123}$$

Pokud se omezíme na rozvoj do druhého řádu, tj. na 10 momentů, pak potřebujeme vypočítat řádově 10^3 maticových elementů[17] z celkového počtu 10^4 koeficientů rozvoje pravděpodobnosti $P(p_1, p_2, p_1', p_2')$ této reakce jako funkce všech proměnných. Pokud ovšem provedeme transformaci $\{p_1, p_2\} \to \{p_\mathrm{T}, p\}$ (a analogicky pro čárkované veličiny) do těžišťových systémů před a po srážce,

$$p_{1,2} = \frac{m_{1,2}}{m_1 + m_2} p_\mathrm{T} \mp p \; , \tag{3.124}$$

kde p_T je hybnost celé soustavy a p hybnost částice s relativní rychlostí ($v = v_2 - v_1$) a redukovanou hmotností ($m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$), pak vzhledem k zachování hybnosti při srážce musí být maticové elementy funkce P úměrné jednotkové matici v indexech α_T, α_T' odpovídajících proměnným p_T, p_T'. Všech 10^4 elementů funkce $P(p_1, p_2, p_1', p_2')$ je tak lineární kombinací pouhých 10^2 členů rozvoje téže funkce $P(p, p')$ vyjádřené pouze v proměnných hybnosti relativního pohybu srážejících se částic,

$$\langle \alpha_1' \alpha_2' | P | \alpha_1 \alpha_2 \rangle = \langle \alpha_1' \alpha_2' | \alpha_\mathrm{T}' \alpha' \rangle \langle \alpha' | P | \alpha \rangle \langle \alpha_\mathrm{T} \alpha | \alpha_1 \alpha_2 \rangle \; . \tag{3.125}$$

Pravděpodobnost P může kromě invariance vůči volbě rychlosti inerciálního systému (která je speciálním důsledkem výše započteného zákona zachování hybnosti) mít i další symetrie, např. může splňovat zachování energie nebo být invariantní vůči natočení vztažné soustavy. Vliv těchto symetrií se nejsnáze vyjádří v reprezentaci sférických harmonik[18]

$$|nlm\rangle = \sum_{|\alpha| = 2n + l} \langle \alpha | nlm \rangle | \alpha \rangle \; . \tag{3.126}$$

V případě pružné srážky se zachovává kinetická energie relativního pohybu, tj. $|p'| = |p|$. V obecném případě se změní o uvolněnou energii vnitřních stupňů volnosti, tj. $P(p, p') \sim \delta(|p'| - \sqrt{p^2 + 2mE})$. V obou případech však můžeme separovat a integrovat radiální část $P(p, p')$ v proměnné p'. Úhlová závislost pravděpodobnosti rozptylu P zpravidla bývá invariantní vůči rotaci prostoru hybností a závisí pouze na úhlu χ rozptylu mezi směry $\vartheta\varphi$ a $\vartheta'\varphi'$ nalétávající a rozptýlené částice,

$$P(p, p') = \delta(|p'| - \sqrt{p^2 + 2mE}) \frac{p}{m} \sigma(\chi) \; , \tag{3.127}$$

kde σ je diferenciální účinný průřez. Vhodnou rotací prostoru hybností pak můžeme dosáhnout splynutí směru $\vartheta\varphi$ s osou z a směru $\varphi' = 0$ s osou x, takže zbývá rozvinout úhlovou závislost rozptylu pouze do Legendreových polynomů v $\cos\chi$,

$$\begin{aligned} \langle n'l'm' | P | nlm \rangle &= \langle n'l' | \delta(|p'| - \sqrt{p^2 + 2mE}) \frac{p}{m} \langle l'm' | \sigma(\chi, |p|) | lm \rangle | nl \rangle \\ &= \delta_l^{l'} \delta_m^{m'} \langle n'l | \delta(|p'| - \sqrt{p^2 + 2mE}) \frac{p}{m} \sigma^l(|p|) | nl \rangle \; . \end{aligned} \tag{3.128}$$

Všechny maticové elementy se tak redukují na lineární kombinace několika málo integrálů úhlové a rychlostní závislosti účinného průřezu srážky.

[17] Tj. pro všechny indexy částice, pro níž srážkový člen počítáme, a pro indexy obou částic do reakce vstupujících.

[18] Protože Hermiteovy polynomy jsou vlastní funkce 1-dim. kvantového harmonického oscilátoru, je zřejmé, že prostorové Hermiteovy polynomy musí být lineární kombinací vlastních funkcí $|nlm\rangle = |nl\rangle|lm\rangle$ příslušného sféricky symetrického hamiltoniánu. Radiální část $|nl\rangle$ je přitom dána zobecněnými Laguerrovými polynomy.