

СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Данную главу мы начнем с обзора основных понятий квантовой механики (§ 1). Мы исходим из того, что читатель уже знаком с основами квантовой механики (см. литературу), и главная цель нашего обзора — напомнить те ее моменты, которые в дальнейшем будут необходимы для иллюстрации проявлений симметрии. К изложению последних мы перейдем после того, как в § 2 дадим строгое определение симметрии. В качестве иллюстрации в § 6 будет рассмотрено движение частицы в постоянном поле, обладающем различной простой симметрией: C_3 , D_3 , S_2 и \mathcal{K}_2 . В конце главы дается представление о применении симметрии в приближенных методах. Более сложные группы и более близкие к действительности физические системы будут рассмотрены в дальнейших главах книги, но все важнейшие следствия симметрии квантовомеханических систем рассматриваются в данной главе.

§ 1. КРАТКИЙ ОБЗОР ОСНОВНЫХ ПОНЯТИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В квантовой механике поведение системы с n степенями свободы, описываемой некоторым набором координат $(r_1, r_2, \dots, r_n) = \mathbf{r}$, полностью определяется ее волновой функцией, или вектором состояния, $\psi(\mathbf{r}, t)$. Для всякой пары \mathbf{r} и t эта волновая функция принимает некоторые, вообще говоря, комплексные значения. Действительная величина $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$ интерпретируется как вероятность того, что в момент времени t координаты системы имеют значения, лежащие внутри элемента объема dV возле точки \mathbf{r} . Поэтому волновая функция должна быть нормирована так, чтобы полная вероятность нахождения системы в каком-либо положении равнялась единице, т. е.

выполнялось равенство

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1, \quad (5.1)$$

в котором интеграл берется по всем значениям координат.

Волновые функции находят, решая уравнение Шредингера

$$H(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.2)$$

в котором $H(\mathbf{r}, t)$ — оператор Гамильтона, или гамильтониан, соответствующий классической функции Гамильтона $H = T + V$, где T — кинетическая и V — потенциальная энергии. Для получения квантовомеханического оператора из соответствующего классического аналога существуют определенные правила, например декартова координата x частицы заменяется оператором x , а сопряженный момент p_x заменяется оператором $-i\hbar(\partial/\partial x)$. Границные условия, налагаемые на дифференциальное уравнение (5.2) (например, обращение в нуль функции Φ на границах системы), являются достаточными для того, чтобы в любой момент времени t функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ была однозначно определена уравнением (5.2), если в момент времени t_0 известна функция $\psi(\mathbf{r}, t_0)$.

Во многих важных задачах квантовой механики используется не зависящий от времени гамильтониан. В таких случаях из самого уравнения (5.2) явствует, что существуют решения, для которых зависимость от времени определяется множителем

$$\psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar), \quad (5.3)$$

где $\psi_E(\mathbf{r})$ — решение (собственная функция) не зависящего от времени уравнения на собственные значения

$$H\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}), \quad (5.4)$$

а E — соответствующее собственное значение. Бесконечный набор собственных функций $\psi_E(\mathbf{r})$ есть полный набор в том смысле, что любую непрерывную функцию с теми же граничными условиями можно разложить в бесконечный ряд по функциям $\psi_E(\mathbf{r})$. Следовательно, любое решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_E a_E \psi_E(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar). \quad (5.5)$$

Решения простого вида (5.3) называют «стационарными состояниями», так как плотность вероятности $|\Phi_E(\mathbf{r}, t)|^2$ не зависит от времени. Собственные значения E физически интерпретируются как энергия системы.

Совокупность всех непрерывных функций, удовлетворяющих налагаемым на уравнение (5.2) граничным условиям, образует функциональное пространство, называемое пространством Гильберта. Скалярное произведение двух функций ψ и φ удобно определить как интеграл

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV \quad (5.6)$$

по всем возможным значениям координат \mathbf{r} . Чтобы энергия E при данном определении скалярного произведения была действительной величиной, гамильтониан должен быть эрмитовым оператором. Как следствие этого, набор собственных функций $\Psi_E(\mathbf{r})$ при данном определении скалярного произведения оказывается ортогональным; таким образом, он может служить удобным базисом. В соответствии с формулой (5.1) функции $\Psi_E(\mathbf{r})$ обычно нормированы на единицу. Отметим, что для стационарного состояния условие (5.1) переходит в равенство $(\psi_E, \Psi_E) = 1$.

Всякой классической наблюдаемой величине O — энергии, импульсу, угловому моменту и т. д. — соответствует некоторый эрмитов оператор O (обычно не зависящий от времени), определенный в гильбертовом пространстве волновых функций. Каждый такой оператор имеет свой набор собственных функций и собственных значений $O\Psi_\lambda^O(\mathbf{r}) = \lambda\Psi_\lambda^O(\mathbf{r})$, причем всякий набор собственных функций $\Psi_\lambda(\mathbf{r})$ образует ортонормированный базис. Собственные значения λ — единственные определенные величины, которые дает измерение наблюдаемой O ; данное значение λ будет получено лишь в том случае, если волновая функция системы в данный момент времени точно соответствует собственной функции $\Psi_\lambda^O(\mathbf{r})$ оператора O . В общем случае волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ не будет совпадать с какой-либо отдельной собственной функцией оператора O , но вследствие полноты системы функций $\Psi_\lambda^O(\mathbf{r})$ всегда возможно разложение

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_\lambda c_\lambda(t) \Psi_\lambda^O(\mathbf{r}). \quad (5.7)$$

Результат измерения наблюдаемой O в таком состоянии однозначно не определен, но $|c_\lambda(t)|^2$ есть вероятность того, что эта наблюдаемая имеет значение λ . Среднее значение оператора O в состоянии ψ равно сумме $\sum_\lambda |c_\lambda(t)|^2 \lambda$. Это среднее значение очень удобно представить в виде скалярного произведения, поскольку

$$(\psi, O\psi) = \sum_{\lambda'} \sum_{\lambda} c_{\lambda'}^*(t) c_{\lambda}(t) \lambda (\psi_{\lambda'}, \psi_{\lambda}) = \sum_{\lambda} |c_{\lambda}(t)|^2 \lambda \quad (5.8)$$

вследствие ортонормированности собственных функций $\psi_\lambda(r)$. В квантовой механике скалярное произведение $(\psi, O\psi)$ обычно обозначают символом $\langle \psi | O | \psi \rangle$. Отметим, что в стационарном состоянии энергия E может быть измерена точно; в роли оператора здесь выступает гамильтониан. В соответствии с нашими обозначениями волновую функцию стационарного состояния следовало бы записать как ψ_E^H , но для краткости мы записываем ее как ψ_E , учитывая особый смысл оператора энергии H .

Если спектр оператора (набор собственных значений) является дискретным, мы сталкиваемся с явлением квантования — случаем, когда измеряемые значения оператора дискретны. Спектр некоторых операторов может быть и непрерывным; в этом случае выражение (5.7) принимает вид

$$\psi(r, t) = \int c(\lambda, t) \psi_\lambda^0(r) d\lambda,$$

где интеграл берется по всей области возможных собственных значений λ .

Квантовую систему можно исследовать экспериментально, измеряя ее энергию и средние значения различных операторов. Измеренные значения можно затем сравнивать со значениями, рассчитанными на основе некоторого модельного гамильтониана. Другой очень важный вид эксперимента — измерение скорости перехода, или его вероятности, для процесса, в котором система изменяется от начального состояния ψ_i до конечного ψ_f . Можно доказать, что вероятность перехода W_{if} пропорциональна квадрату недиагонального матричного элемента:

$$W_{if} \sim |(\psi_f, O\psi_i)|^2, \quad (5.9)$$

где O — оператор, характеризующий данный процесс. Понятно, что именно из измеренных средних значений и

вероятностей перехода можно извлечь информацию о симметрии квантовых систем, и в следующих параграфах данной главы мы покажем, как симметрия влияет на указанные величины. Исследование взаимодействия системы, например атома или атомного ядра, с электромагнитным полем является особенно удобным и ценным методом получения такой информации. Он позволяет определять как средние значения (путем исследования энергетических возмущений), так и вероятности переходов (путем измерения поглощения и испускания излучения). Не вдаваясь детально в теорию, укажем основные характеристики электромагнитного взаимодействия и соответствующие операторы.

Как и в классической физике, взаимодействие системы с электромагнитным полем зависит от положений и моментов заряженных частиц, составляющих систему. Помимо общего заряда системы наиболее важными величинами являются электрический и магнитный дипольные моменты, которые для системы частиц i с зарядами e_i даются выражениями $\sum_i e_i \mathbf{r}_i$ и $\sum_i (e_i/2Mc) \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$. (Для частиц со спином существует дополнительный вклад в магнитный момент, см. гл. 8, § 4.) В атоме, где все Z электронов имеют одинаковый заряд, эти выражения упрощаются до $-Ze\mathbf{R}$ и $-(e/2Mc)\mathbf{L}$, где \mathbf{R} — радиус-вектор центра масс, а \mathbf{L} — полный угловой момент. Оба этих оператора входят в выражение для энергетических возмущений и вероятностей перехода в квантовой системе. В частности, энергетический сдвиг, обусловленный однородным магнитным полем \mathbf{B} , равен $e\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}/2Mc$. При переходах в атомах существен в основном электрический дипольный момент, и в случае неполяризованного излучения вклад будут вносить все три компоненты вектора \mathbf{R} . При поглощении же поляризованного света существенными оказываются лишь некоторые компоненты вектора \mathbf{R} . Например, в случае так называемого плоскополяризованного света направление электрического поля задается вектором \mathbf{p} , перпендикулярным направлению пучка света. Соответствующим оператором в этом случае является компонента вектора \mathbf{R} в направлении \mathbf{p} , и свет называют поляризованным в направлении \mathbf{p} .