где суммирование производится по парам частиц 12, 13 и 23. Матричные элементы операторов $\hat{s}_a\hat{s}_b$ между состояниями с различными значениями пар чисел σ_a, σ_b определяются с помощью формул (55,6) и равны

$$\langle 1/2,\ 1/2\,|\,s_a s_b\,|\,1/2,\ 1/2\rangle = 1/4, \qquad \langle 1/2,\ -1/2\,|\,s_a s_b\,|\,1/2,\ -1/2\rangle = -1/4,$$
$$\langle 1/2,\ -1/2\,|\,s_a s_b\,|\,-1/2,\ 1/2\rangle = 1/2.$$

Начинаем с определения энергии, отвечающей наибольшему возможному значению проекции полного спина $M_S = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$, т. е. значению $M_S = 3/2$; тем самым мы определим энергию состояния с полным спином $S = 3/2$. Вычисляя соответствующий диагональный матричный элемент оператора (1), найдем

$$\Delta E_{3/2} = -(J_{12} + J_{13} + J_{23}).$$

Далее переходим к состояниям с $M_S = 1/2$. Это значение M_S может осуществиться тремя способами, в зависимости от того, какое из чисел σ_1, σ_2, σ_3 равно $-1/2$ (а два других 1/2). Поэтому мы получили бы для этих состояний секулярное уравнение третьей степени. Однако вычисление может быть сразу упрощено, если заметить, что один из корней этого уравнения должен отвечать найденной уже энергии состояния с $S = 3/2$, и потому секулярное уравнение должно делиться на $\Delta E - \Delta E_{3/2}$; это обстоятельство позволяет в данном случае обойтись без вычисления свободного члена в кубическом уравнении[1].

Именно, вычисляя старшие члены уравнения, получим

$$(\Delta E)^3 + (J_{12} + J_{13} + J_{23})(\Delta E)^2 +$$
$$+ [J_{12}J_{13} + J_{12}J_{23} + J_{13}J_{23} - (J_{12}^2 + J_{13}^2 + J_{23}^2)]\,\Delta E + \dots = 0,$$

и разделив на $\Delta E + J_{12} + J_{13} + J_{23}$, найдем два уровня энергии, отвечающие состояниям со спином $S = 1/2$:

$$\Delta E_{1/2} = \pm\left[J_{12}^2 + J_{13}^2 + J_{23}^2 - J_{12}J_{13} - J_{12}J_{23} - J_{13}J_{23}\right]^{1/2}.$$

Таким образом, имеется всего три уровня энергии в соответствии с подсчетом, произведенным в задаче 1 § 63.

3. В каких состояних ядро ^{8}Be может распасться на две α-частицы?

Р е ш е н и е. Поскольку α-частица не обладает спином, система двух α-частиц может обладать лишь четным орбитальным моментом (совпадающим с полным моментом), и ее состояния четны. Поэтому указанный распад возможен лишь из четных состояний ядра ^{8}Be с четным полным моментом.

§ 63. Симметрия по отношению к перестановкам

Рассматривая систему, состоящую всего из двух частиц, мы могли утверждать, что ее координатные волновые функции стационарных состояний $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ должны быть либо симметричны, либо антисимметричны. В общем же случае системы из произвольного числа частиц решения уравнения Шредингера (координатные волновые функции) отнюдь не должны непременно быть симметричными или антисимметричными по отношению к перестановке любой пары частиц, как это имеет место для полных волновых функций (включающих спиновой множитель). Это связано с тем, что перестановка одних только координат двух частиц

[1] Такой прием в особенности полезен при аналогичных вычислениях для систем с бóльшим числом частиц.

еще не соответствует их физической перестановке. Физическая одинаковость частиц приводит здесь лишь к тому, что гамильтониан системы инвариантен по отношению к перестановке частиц, и потому если некоторая функция есть решение уравнения Шредингера, то решениями являются и функции, получающиеся из исходной посредством различных перестановок переменных.

Предварительно сделаем несколько замечаний о перестановках вообще. В системе из N частиц возможны всего $N!$ различных перестановок. Если представить себе все частицы перенумерованными, то каждую перестановку можно изобразить определенной последовательностью чисел 1, 2, 3, ... Каждая такая последовательность может быть получена из натуральной последовательности 1, 2, 3, ... последовательными перестановками пар частиц. *Перестановку* называют *четной* или *нечетной* в зависимости от того, осуществляется ли она четным или нечетным числом парных перестановок. Обозначим посредством $\hat{P}$ операторы перестановок N частиц и введем величину δ_P, равную $+1$, если $\hat{P}$ есть четная перестановка, и -1, если перестановка нечетная. Если φ есть симметричная по всем частицам функция, то

$$\hat{P}\varphi = \varphi,$$

а если функция антисимметрична по всем частицам, то

$$\hat{P}\varphi = \delta_P\varphi.$$

Из произвольной функции $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ можно образовать симметричную функцию посредством операции *симметризации*, которую можно записать так:

$$\varphi_{\text{симм}} = \text{const} \sum_P \hat{P}\varphi, \tag{63,1}$$

где суммирование производится по всем возможным перестановкам. Образование же антисимметричной функции (эту операцию иногда называют *альтернированием*) может быть записано в виде

$$\varphi_{\text{анти}} = \text{const} \sum_P \delta_P \hat{P}\varphi. \tag{63,2}$$

Возвратимся к вопросу о поведении волновых функций φ системы одинаковых частиц по отношению к перестановкам [1]).

[1]) С математической точки зрения задача состоит в нахождении неприводимых представлений группы перестановок. Подробное изложение математической теории групп перестановок см. в книгах: *Г. Вейль*, Теория групп и квантовая механика, «Наука», 1985. *М. Хамермеш*, Теория групп и ее применения к физическим проблемам, ИЛ, 1966; *И. Г. Каплан*, Симметрия многоэлектронных систем, «Наука», 1969.

Тот факт, что гамильтониан системы $\hat{H}$ симметричен по всем частицам, означает, математически, что он коммутативен со всеми операторами перестановок $\hat{P}$. Однако эти операторы не коммутативны друг с другом и поэтому не могут быть приведены одновременно к диагональному виду. Это значит, что волновые функции φ не могут быть выбраны так, чтобы каждая из них была симметрична или антисимметрична по отношению ко всем отдельным парным перестановкам [1]).

Поставим задачу об определении возможных типов симметрии функций $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ от N переменных (или совокупностей нескольких таких функций) по отношению к перестановкам переменных. Симметрия должна быть такой, чтобы она не могла быть повышена, т. е. чтобы всякая дополнительная операция симметризации или альтернирования при применении к этим функциям обращала бы их либо в линейные комбинации их же самих, либо тождественно в нуль.

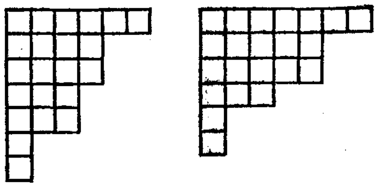


Рис. 21

Мы знаем уже две операции, которые приводят к функциям максимальной симметрии: симметризация по всем переменным и альтернирование по всем переменным. Эти операции могут быть обобщены следующим образом.

Разобьем совокупность всех N переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N$ (или, что то же самое, индексов 1, 2, 3, ..., N) на несколько рядов, содержащих N_1, N_2, ... элементов (переменных): $N_1 + N_2 + \ldots$ $\ldots = N$. Такое разбиение можно изобразить наглядно схемой (так называемая *схема Юнга*), в которой каждое из чисел N_1, N_2, ... представлено строкой из нескольких клеток (так, на рис. 21 представлена схема разбиений $6+4+4+3+3+1+1$ и $7+5+5+3+1+1$ для $N = 22$); в каждом из квадратов следует поместить одно из чисел 1, 2, 3, ... Если расположить строки в порядке их укорочения (так это и сделано на рис. 21), то схема будет содержать не только последовательные горизонтальные строки, но и вертикальные столбцы.

Произведем симметризацию некоторой произвольной функции $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ по переменным, входящим в состав каждой из строк. После этого операция альтернирования может производиться только по отношению к переменным, входящим в различные

[1]) Лишь для системы из двух частиц имеется всего один оператор перестановки, который может быть приведен к диагональному виду одновременно с гамильтонианом.

строки; альтернирование по паре переменных, находящихся в одной строке, даст, очевидно, тождественно нуль.

Выбрав из каждой строки по одной переменной, мы можем, не ограничивая общности, считать их находящимися в первых клетках строк (после симметризации порядок расположения переменных по клеткам каждой строки несуществен); произведем альтернирование по этим переменным. Вычеркнув затем первый столбец, произведем альтернирование по переменным, выбранным по одному из каждой строки укороченной таким образом схемы; теперь эти переменные можно снова считать находящимися в первых клетках укороченных строк. Продолжая этот процесс, мы придем к функции, сначала симметризованной по переменным каждой строки, а затем альтернированной по переменным каждого столбца (разумеется, после альтернирования функция, вообще говоря, перестает быть симметричной по переменным каждой строки; симметричность сохраняется лишь по отношению к переменным, находящимся в клетках первой строки, выступающих за остальные строки).

Распределяя N переменных различным образом по строкам схемы Юнга (распределение по клеткам каждой строки несущественно), мы получим таким способом ряд функций, которые при произвольной перестановке переменных преобразуются друг через друга [1]. Необходимо, однако, подчеркнуть, что не все эти функции линейно независимы; число независимых функций, вообще говоря, меньше числа возможных распределений переменных по строкам схемы; мы не станем останавливаться здесь на этом подробнее [2].

Таким образом, каждая юнговская схема определяет некоторый тип симметрии функций по отношению к перестановкам. Составляя все возможные (для данного N) юнговские схемы, мы найдем все возможные типы симметрии. Это сводится к разбиению числа N всеми возможными способами на сумму нескольких меньших слагаемых, причем в число возможных разбиений включается также и само число N (так, для $N = 4$ возможны разбиения: $4, 3+1, 2+2, 2+1+1, 1+1+1+1$).

Каждому уровню энергии системы можно привести в соответствие некоторую юнговскую схему, определяющую перестановочную симметрию соответствующих решений уравнения Шредин-

---

[1] Можно было бы производить симметризацию и альтернирование в обратном порядке — сначала альтернировать по переменным в каждом столбце, а затем симметризовать по переменным в строках. Это, однако, не дало бы ничего нового, так как получающиеся обоими способами функции являются линейными комбинациями друг друга.

[2] Преобразующиеся друг через друга независимые функции составляют базис неприводимого представления группы перестановок. Число этих функций есть размерность представления. Для случая частиц со спином 1/2 оно определено в задаче 1 к этому параграфу.

гера; при этом каждому значению энергии соответствует, вообще говоря, несколько различных функций, при перестановках преобразующихся друг через друга. Наличие этого «перестановочного вырождения» связано с упоминавшейся уже некоммутативностью операторов $\hat{P}$, каждый из которых коммутативен с гамильтонианом (ср. § 10, стр. 46). Подчеркнем, однако, что оно не означает наличия какого-либо дополнительного физического вырождения уровней энергии. Все эти различные координатные волновые функции, умноженные на спиновые функции, входят в одну определенную комбинацию — полную волновую функцию, — удовлетворяющую (в зависимости от спина частиц) условию симметричности или антисимметричности.

Среди различных типов симметрии всегда существует (при данном N) два, которым соответствуют всего по одной функции. Одному из них отвечает функция, симметричная по всем переменным, а другому — антисимметричная (в первом случае юнговская схема состоит всего из одной строки из N клеток, а во втором — из одного столбца).

Перейдем к спиновым волновым функциям $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N)$. Их типы симметрии по отношению к перестановкам частиц определяются теми же юнговскими схемами, причем роль переменных играют проекции спинов частиц. Возникает вопрос о том, какая схема должна соответствовать спиновой функции при заданной схеме координатной функции. Предположим сначала, что частицы обладают целым спином. Тогда полная волновая функция ψ должна быть симметрична по всем частицам. Для этого симметрия спиновых и координатных функций должна определяться одной и той же юнговской схемой, а полная волновая функция ψ выражается в виде определенных билинейных комбинаций тех и других; мы не станем останавливаться здесь на вопросе о составлении этой комбинации.

Пусть теперь частицы обладают полуцелым спином. Тогда полная волновая функция должна быть антисимметричной по всем частицам. Можно показать, что для этого юнговские схемы координатной и спиновой функций должны быть дуальными: получаться друг из друга заменой строк столбцами и обратно (таковы, например, две схемы, изображенные на рис. 21).

Остановимся подробнее на важном случае частиц со спином 1/2 (например, электронов). Каждая из спиновых переменных $\sigma_1, \sigma_2, \ldots$ пробегает здесь всего два значения $\pm 1/2$. Поскольку функция, антисимметричная по каким-либо двум переменным, обращается в нуль, когда эти переменные имеют одинаковые значения, то ясно, что функция χ может быть альтернирована лишь по парам переменных; уже при альтернировании по трем переменным две из них во всяком случае будут иметь одинаковые значения, так что получится тождественно нуль.

Таким образом, для системы электронов юнговские схемы спиновых функций могут содержать столбцы длиной лишь в одну или две клетки (т. е. всего одну или две строки); в юнговских же схемах координатных функций то же самое относится к длине строк. Число возможных типов перестановочной симметрии для системы из N электронов равно, следовательно, числу возможных разбиений числа N на сумму единиц и двоек. При четном N это число равно $N/2+1$ (разбиения с 0, 1, ..., $N/2$ двоек), а при нечетном оно равно $(N+1)/2$ (разбиения с 0, 1, ..., $(N-1)/2$ двоек). Так, на рис. 22 изображены возможные юнговские схемы (координатные и спиновые) для $N=4$.

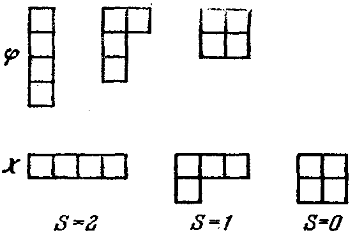


Рис. 22

Легко видеть, что каждый из этих типов симметрии (т. е. каждая из юнговских схем) соответствует определенному полному спину S системы электронов. Будем рассматривать спиновые функции в спинорном виде, т. е. в виде спинора $\chi^{\lambda\mu\dots}$ N-го ранга, причем его индексы (каждый из которых соответствует спину отдельной частицы) будут теми переменными, которые располагаются в клетках юнговских схем. Рассмотрим спиновую юнговскую схему, состоящую из двух строк, имеющих по N_1 и N_2 клеток $(N_1+N_2=N,\ N_1 \geqslant N_2)$. В первых N_2 столбцах имеется по две клетки, и по соответствующим парам индексов спинор должен быть антисимметричен. По индексам же, находящимся в последних $n=N_1-N_2$ клетках первой строки, спинор должен быть симметричен. Но, как мы знаем, такой спинор N-го ранга сводится к симметричному спинору n-го ранга, которому соответствует полный спин, равный $S=n/2$. Возвращаясь к юнговским схемам координатных функций, мы можем сказать, что схема с n строками, содержащими по одной клетке, соответствует состоянию с полным спином $S=n/2$. При четном N полный спин может иметь целые значения от 0 до $N/2$, а при нечетном N — полуцелые значения от 1/2 до $N/2$, как и должно было быть.

Подчеркнем, что такое однозначное соответствие юнговских схем полному спину имеет место только для систем частиц со спином 1/2; для системы всего из двух частиц мы убедились в этом уже в предыдущем параграфе. Для системы N частиц со спином s спиновая волновая функция строится из произведения N симметричных спиноров ранга $2s$, т. е. является спинором ранга $2Ns$. Если этот спинор симметризовать в соответствии с определенной схемой Юнга из N клеток, то из независимых компонент такого симметризованного спинора можно образовать обычно несколько наборов линейных комбинаций, отвечающих каждый различным значениям полного спина системы S.

Подобно тому как для частиц со спином 1/2 схема Юнга спиновых функций не может содержать столбцы с более чем двумя клетками, так для частиц с произвольным спином s длина столбцов не должна превышать $2s+1$ клеток.

Если число частиц в системе N есть целое кратное от $2s+1$, то среди возможных юнговских схем есть прямоугольная схема, все столбцы которой содержат по $2s+1$ клеток. Такой схеме отвечает одно определенное значение полного спина: $S=0$. Отсюда можно заключить, что всяким вообще двум (спиновым) юнговским схемам, которые можно сложить вместе в прямоугольник с высотой $2s+1$, отвечают одинаковые значения S [1]). Этот вывод есть просто следствие того факта, что при сложении двух моментов суммарный момент может оказаться равным нулю, лишь если складываемые моменты одинаковы по величине.

В заключение этого параграфа вернемся к отмеченному уже ранее (см. примечание на стр. 82) обстоятельству, что для систем из нескольких одинаковых частиц нельзя утверждать, что волновая функция ее стационарного состояния с наименьшей энергией не имеет узлов. Теперь мы можем уточнить это замечание и выяснить его происхождение.

Волновая функция (речь идет о координатной функции), не имеющая узлов, непременно должна быть симметрична по всем частицам; если бы она была антисимметрична по отношению к перестановке какой-либо пары частиц 1, 2, то она обратилась бы в нуль при $\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2$. Но если система состоит из трех или более электронов, то полностью симметричная координатная волновая функция вообще не допускается (юнговская схема координатной функции не может иметь строки с более чем двумя клетками). Таким образом, хотя решение уравнения Шредингера, соответствующее наименьшему собственному значению, и не имеет узлов (согласно теореме вариационного исчисления), но это решение может оказаться физически недопустимым; тогда нормальному состоянию системы будет соответствовать не наименьшее из собственных значений уравнения Шредингера, и волновая функ-

[1]) Таковы, например, следующие пары схем (при $s=1$):

Дополнительные друг к другу схемы изображены сплошными и пунктирными линиями.

ция этого состояния будет, вообще говоря, иметь узлы. Вообще, для частиц с полуцелым спином s такое положение имеет место в системах с более чем $2s+1$ частицами. Для систем же, состоящих из бозонов, полностью симметричная координатная волновая функция всегда возможна.

Задачи

1. Определить число уровней энергии с различными значениями полного спина S для системы из N частиц со спином 1/2 (*F. Bloch*, 1929).

Решение. Заданное значение проекции полного спина системы $M_S = \sum \sigma$ можно осуществить

$$f(M_S) = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}+M_S\right)!\left(\frac{N}{2}-M_S\right)!}$$

способами ($N/2 + M_S$ частицам приписываем $\sigma = 1/2$, а остальным $\sigma = -1/2$). Каждому уровню энергии с заданным значением S соответствует $2S+1$ состояний со значениями $M_S = S, S-1, \ldots, -S$. Поэтому легко сообразить, что число различных уровней с заданным значением S равно

$$n(S) = f(S) - f(S+1) = \frac{N!\,(2S+1)}{\left(\frac{N}{2}+S+1\right)!\left(\frac{N}{2}-S\right)!}.$$

Полное число $n = \sum\limits_S n(S)$ различных уровней энергии равно

$$n = f(0) = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}!\right)^2}$$

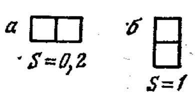
при четном N, или

$$n = f\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{N!}{\left(\frac{N+1}{2}\right)!\left(\frac{N-1}{2}\right)!}$$

при нечетном N.

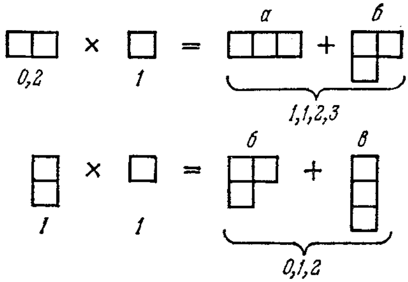
2. Найти значения полного спина S, осуществляющиеся при различных типах симметрии спиновых функций системы из двух, трех или четырех частиц со спинами 1.

Решение. Для двух частиц соответствие устанавливается тем, что множитель, на который умножается спиновая функция при перестановке частиц, должен быть равен $(-1)^{2s-S}$ (см. конец § 62). Для частиц со спином $s=1$ отсюда получается соответствие:

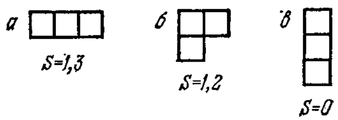


(1)

Схема Юнга для системы трех частиц получаются добавлением к схемам (1) одной клетки всеми возможными способами. Это можно записать в виде символических равенств:



Под схемами указаны значения S, причем значения полного спина системы трех частиц (схемы справа) получаются из спинов систем двух и одной частиц (схемы слева) по правилу сложения моментов[1]. Распределение получающихся значений S между отдельными схемами справа можно установить, заметив, что схеме *в* (столбик из трех клеток) отвечает $S = 0$; поэтому схеме *б* отвечают оставшиеся (во втором равенстве) значения 1 и 2, а схеме *а* — оставшиеся после *б* (в первом равенстве) значения 1 и 3:



Схемы Юнга для системы четырех частиц получаются прибавлением одной клетки к схемам (2) (с соблюдением условия, чтобы столбцы не содержали более трех клеток):

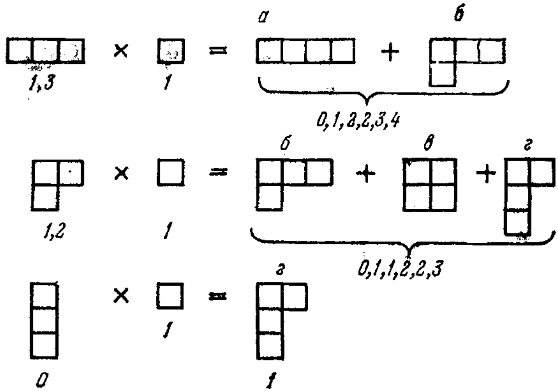
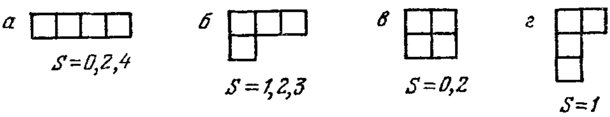


Схема *в* складывается со схемой 1*а* в прямоугольник со столбцами из трех клеток; поэтому ей отвечают те же значения $S = 0,2$, что и для 1*а*. Значения S

[1]) Повторение дважды цифры 1 под схемами справа связано с возникновением этого значения момента один раз от сложения моментов 0 и 1, а другой — от сложения моментов 2 и 1.

для схемы *б* определяются по остатку во втором равенстве, а затем для схемы *а* — по остатку в первом равенстве; значение спина для схемы *г* однозначно определяется третьим равенством:



§ 64. Вторичное квантование. Случай статистики Бозе

В теории систем, состоящих из большого числа одинаковых частиц, широко применяется особый метод рассмотрения, известный под названием *вторичного квантования*. Этот метод в особенности необходим в релятивистской теории, где приходится иметь дело с системами, в которых самое число частиц является переменным [1]).

Пусть $\psi_1(\xi)$, $\psi_2(\xi)$, ... — некоторая полная система ортогональных и нормированных волновых функций стационарных состояний одной частицы [2]). Это могут быть состояния частицы в некотором произвольно выбранном внешнем поле, но обычно выбираются просто плоские волны — волновые функции свободной частицы с определенными значениями импульса (и проекции спина). При этом с целью сведéния спектра состояний к дискретному рассматривают движение частиц в большой, но ограниченной области пространства; для движения в ограниченном объеме собственные значения компонент импульса пробегают дискретный ряд (причем интервалы между соседними значениями обратно пропорциональны линейным размерам области и стремятся к нулю при их увеличении).

В системе свободных частиц импульсы частиц сохраняются по отдельности. Тем самым сохраняются и *числа заполнения* состояний — числа N_1, N_2, ..., указывающие, сколько частиц находится в каждом из состояний ψ_1, ψ_2, ... В системе взаимодействующих частиц импульсы каждой из них уже не сохраняются, а потому не сохраняются и числа заполнения. Для такой системы можно говорить лишь о распределении вероятностей различных значений чисел заполнения. Поставим себе целью построить математический аппарат, в котором именно числа

[1]) Метод вторичного квантования был развит *Дираком* для фотонов в применении к теории излучения (1927 г.) и затем распространен на фермионы *Вигнером* и *Иорданом* (*E. Wigner*, *P. Jordan*, 1928).

[2]) Как и в § 61, ξ обозначает совокупность координат и проекции спина σ частицы, а под интегрированием по $d\xi$ будет подразумеваться интегрирование по координатам вместе с суммированием по σ.