§ 65. Волновые функции для системы фермионов и бозонов. Принцип Паули

Рассмотрим систему, состоящую из N невзаимодействующих между собой тождественных частиц. Уравнение Шредингера для стационарных состояний такой системы имеет вид

$$\sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\xi_i)\right]\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = E\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N). \quad (65,1)$$

В § 14 было показано, что решением этого уравнения служит функция

$$\psi = \psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)\ldots\psi_{k_N}(\xi_N). \quad (65,2)$$

Здесь k_1, k_2, ... — квантовые числа состояний, в которых могут находиться частицы. Каждое k_i представляет собой полный набор квантовых чисел, характеризующих состояние отдельной частицы. Функции ψ_{ki} являются решением уравнения Шредингера для одной частицы

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i\psi_{k_i}(\xi_i) + U(\xi_i)\psi_{k_i}(\xi_i) = E_{k_i}\psi_{k_i}(\xi_i).$$

Однако функция (65,2) не удовлетворяет требованиям симметрии. В общем случае она не принадлежит ни к симметричным, ни к антисимметричным функциям. Так как уравнение (65,1) линейно, то суперпозиция решений типа (65,2) будет также его решением. Для получения волновой функции, обладающей требуемой симметрией, следует взять соответствующую суперпозицию волновых функций.

Для простоты рассмотрим систему, состоящую всего из двух невзаимодействующих частиц. Несимметризованными волновыми функциями служат, очевидно,

$$\psi_1(\xi_1, \xi_2) = \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2); \quad \psi_2(\xi_1, \xi_2) = \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2),$$

где индексы 1 и 2 при волновых функциях $\psi_1(\xi_1)$, $\psi_1(\xi_2)$ и $\psi_2(\xi_1)$, $\psi_2(\xi_2)$ обозначают два разных состояния частицы. Волновые функции $\psi_1(\xi_1, \xi_2)$; $\psi_2(\xi_1, \xi_2)$ отвечают одной и той же энергии системы. Из этих функций можно составить две симметризованные комбинации, соответствующие той же энергии:

$$\psi_s = C_1[\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) + \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)],$$
$$\psi_a = C_2[\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)].$$

Первая волновая функция является симметричной относительно перестановки частиц, а вторая — антисимметричной. Постоянные C_1 и C_2 могут быть определены из условия нормировки. Если функции $\psi_1(\xi_1)$ и $\psi_2(\xi_2)$ нормировать на единицу, а ψ_s (и ψ_a) нормировать условием $\int |\psi_s|^2 dV_1 dV_2 = 1$, то простое вычисление дает в обоих случаях

$$C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Поэтому нормированные и симметризованные функции можно написать в виде

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) + \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)], \tag{65,3}$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2)]. \tag{65,4}$$

Не представляет теперь труда обобщить формулы (65,3) и (65,4) на случай произвольного числа невзаимодействующих частиц. Именно, для системы бозонов, описываемой симметричными функциями, имеем

$$\psi_s = \left(\frac{n_1! n_2! \ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum_P \psi_{k_1}(\xi_1)\psi_{k_2}(\xi_2)\ldots\psi_{k_N}(\xi_N), \tag{65,5}$$

где суммирование ведется по всем возможным перестановкам разных индексов $k_1 \ldots k_N$. Через n_i обозначено число индексов, принимающих одно и то же i-е значение. Таким образом, числа n_i показывают, сколько частиц находится в данном ψ_i-состоянии, причем $\sum\limits_i n_i = N$. Волновая функция (65,5) нормирована на единицу. Действительно, из-за ортогональности функции $\psi_k(\xi)$ вклад в нормировочный интеграл дают лишь квадраты модуля каждого члена суммы. Число членов суммы равно $\frac{N!}{n_1! n_2! \ldots}$. Аналогично, для системы фермионов получаем

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\xi_1) & \ldots & \psi_{k_1}(\xi_N) \\ \psi_{k_2}(\xi_1) & \ldots & \psi_{k_2}(\xi_N) \\ \cdot & \cdot\;\cdot\;\cdot & \cdot \\ \psi_{k_N}(\xi_1) & \ldots & \psi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \tag{65,6}$$

Симметризованные нормированные волновые функции ψ_s и ψ_a описывают состояние системы N невзаимодействующих бозонов и фермионов соответственно.

Рассмотрим теперь, как изменится волновая функция системы, если между тождественными частицами существует взаимодействие. Предположим, что оно является зависящим от времени. Точная волновая функция может быть написана в виде одной из суперпозиций

$$\psi = \sum_i c_i(t)(\psi_s)_i, \qquad \psi = \sum_k c_k(t)(\psi_a)_k.$$

Коэффициенты c_i и c_k представляют зависящие от времени амплитуды вероятности соответствующих i-х и k-х симметричных и антисимметричных состояний.

Взаимодействие вызывает переходы в системе. Как это непосредственно следует из закона сохранения симметрии, изложенного в предыдущем параграфе, при любых внешних воздействиях система будет переходить в состояния с той же симметрией.

Таким образом, волновая функция, описывающая систему взаимодействующих частиц, выражается через волновые функции системы невзаимодействующих частиц с определенной симметрией.

Найденные волновые функции (65,5) и (65,6) позволяют получить ряд важнейших результатов.

Рассмотрим прежде всего систему ферми-частиц. Предположим, что две частицы в системе находятся в одном и том же квантовом состоянии, т. е. $k_1 = k_2$. Это означает, что две частицы имеют одинаковый полный набор квантовых чисел, например одно и то же значение квантовых чисел n, l, m, s_z при движении в поле с центральной симметрией или p_x, p_y, p_z, s_z при свободном движении с определенным импульсом.

Тогда в определителе (65,6) две строки оказываются одинаковыми, и волновая функция обратится в нуль тождественно. Тем самым доказано следующее утверждение: при измерении в системе тождественных частиц Ферми не может быть одновременно обнаружено две или более частиц в одном и том же квантовом состоянии. Это известный принцип Паули, установленный им на основании анализа опытных данных еще до появления квантовой механики.

Часто принцип Паули удобно формулировать в терминах квазиклассического приближения: «в каждой ячейке фазового пространства объемом $(2\pi\hbar)^3$ не может находиться более одной частицы с данной ориентацией спина».

Принцип Паули, как мы видели в статистической физике, определяет статистическое поведение систем, построенных из тождественных частиц с полуцелым спином. Не меньшее значение имеет принцип Паули для понимания закономерностей построения многоэлектронных атомов и сложных ядер, разбору которых будет посвящена следующая глава.

Для дальнейшего рассмотрим следующую задачу. Пусть система состоит из N тождественных частиц (бозонов). Каждый из бозонов находится в данный момент времени в одном и том же состоянии с волновой функцией $\psi(\xi)$, которая нормирована следующим образом:

$$\int \psi^*(\xi)\,\psi(\xi)\,dV = N.$$

Определим среднюю энергию системы в этом состоянии. Гамильтониан такой системы частиц запишем в виде

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i(\xi_i) + \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \hat{W}_{ij}(\xi_i, \xi_j), \tag{65,7}$$

где $\hat{H}_i$ — оператор энергии i-го бозона и $\hat{W}_{ij}$ — оператор энергии взаимодействия i-го и j-го бозонов. Волновая функция системы бозонов, нормированная на единицу, имеет в этот момент времени вид

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N^N}}\,\psi(\xi_1)\,\psi(\xi_2)\ldots\psi(\xi_N).$$

Средняя энергия системы в этом состоянии равна

$$\bar{H} = \int \psi^*(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,\hat{H}\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,dV_1 dV_2 \ldots dV_N.$$

Учитывая тождественность бозонов и считая $N \gg 1$, получаем

$$\bar{H} = \int \psi^*(\xi_i)\,\hat{H}_i\psi(\xi_i)\,dV_i + \\ + \frac{1}{2}\int \psi^*(\xi_i)\,\psi^*(\xi_j)\,\hat{W}_{ij}(\xi_i, \xi_j)\,\psi(\xi_i)\,\psi(\xi_j)\,dV_i\,dV_j. \tag{65,8}$$

Если частицы не взаимодействуют, то $\bar{W} \equiv 0$, и среднее значение энергии имеет вид

$$\bar{H} = \int \psi^*(\xi_i)\,\hat{H}_i\psi(\xi_i)\,dV_i. \tag{65,9}$$

Выражения (65,8) и (65,9) потребуются нам для дальнейшего.

§ 66. Волновая функция системы из двух тождественных частиц со спином $^1/_2$

Имея в виду дальнейшие приложения, рассмотрим более подробно волновую функцию системы, состоящей из двух частиц со спином $^1/_2$, например двух электронов или протонов.

Полная волновая функция $\psi_n(\boldsymbol{r}_1, s_{1z}, \boldsymbol{r}_2, s_{2z})$ зависит от пространственных и спиновых координат обеих частиц и антисимметрична в этих переменных. Предполагая, что внешнее магнитное поле отсутствует, а взаимодействие между частицами не зависит от их спинов, представим полную волновую функцию в виде произведения волновых функций, зависящих только от пространственных и от спиновых переменных.

$$\psi_n(\boldsymbol{r}_1, s_{1z}, \boldsymbol{r}_2, s_{2z}) = \Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\,\varphi(s_{1z}, s_{2z}). \tag{66,1}$$