

ГЛАВА VIII

СПИН И ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

§ 59. Спин элементарных частиц

До сих пор мы предполагали, что состояние отдельной микрочастицы задано, если известны три ее координаты или три проекции импульса или вообще три величины, образующие полный набор. Оказалось, что целый ряд экспериментальных фактов указывает на существование у ряда микрочастиц, например у электронов, протонов, нейтронов, специфической внутренней степени свободы. С этой внутренней степенью свободы, связанной некоторый собственный механический момент частицы, не зависящий от ее орбитального движения. Этот механический момент частицы получил название спина (от английского слова *to spin* — вращаться). Существование у электрона спина было установлено еще до создания квантовой механики. Были сделаны попытки интерпретировать спин как проявление вращения частицы вокруг собственной оси (отсюда и его название). Однако такая классическая трактовка оказалась несостоятельной. Все попытки получить правильное значение отношения между механическим и магнитным моментом для системы распределенного вращающегося заряда, оказались безуспешными. Что же касается модели твердого вращающегося шарика (для которой можно получить любое значение этого отношения), то, как было пояснено в § 13 ч. II, такая модель противоречит общим положениям теории относительности. Разрешение этого противоречия было найдено в квантовой механике. Как мы увидим ниже, внутренняя степень свободы и связанный с ней спин имеют специфически квантовый характер. При переходе к классической механике $\hbar \rightarrow 0$ спин обращается в нуль. Поэтому спин не имеет никаких классических аналогов и не допускает интерпретации классиче-

водорода, находящихся в S -состоянии, то этот пучок расщепляется на два. Между тем в S -состоянии орбитальный механический момент, а следовательно и орбитальный магнитный момент, отсутствует, и пучок должен был бы проходить магнитное поле, не испытывая никакого отклонения.

Двукратное расщепление свидетельствует о двух возможных ориентациях магнитного момента электрона. По величине расщепления можно определить значение спинового магнитного момента.

Прямые опыты, проведенные Эйнштейном и де Гаазом, позволили определить отношение собственного механического и магнитного моментов.

Спин электрона (собственный механический момент) обладает общими свойствами квантовомеханического момента, которые были разобраны в § 51. Строго это было доказано с помощью аппарата теории групп. В частности, собственное значение оператора квадрата спинового момента $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ выражается формулой

$$s(s+1)\hbar^2, \quad (59,1)$$

где через s мы обозначили соответствующее квантовое число — внутреннее или спиновое квантовое число частицы. Часто это квантовое число кратко именуют величиной спина частицы.

Число возможных проекций спина на произвольно ориентированную ось z равно $2s + 1$. Значение внутреннего числа s для той или иной элементарной частицы должно быть определено на опыте. Для электрона существование и величина спина строго вытекают из релятивистской квантовой механики (теории Дирака), изложению которой будет посвящена гл. XV.

Спин наиболее часто встречающихся элементарных частиц равен: электронов $s = \frac{1}{2}$, протонов и нейtronов $s = \frac{1}{2}$, π -мезонов $s = 0$, μ -мезонов $s = \frac{1}{2}$. Это означает, что возможные значения проекций спинового момента на произвольно ориентированную в пространстве ось равны, например, для электрона и других частиц со спином $\frac{1}{2}$

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (59,2)$$

$$\mu = \frac{e}{mc} s, \quad (59,4)$$

в то время как для орбитального движения это отношение вдвое меньше (см. § 63).

В § 118 мы покажем, что такая величина собственного магнитного момента также может быть выведена теоретически из релятивистского волнового уравнения Дирака.

Спиновые свойства элементарных частиц играют огромную роль как в области микроявлений, так и в поведении макроскопических тел. Последнее обстоятельство связано с тем, что спин непосредственно определяет статистические свойства систем, построенных из квантовых частиц.

§ 60. Операторы спина

Хотя, как мы увидим ниже, существование у электрона спина и все связанные с ним свойства могут быть установлены теоретически из положений релятивистской квантовой механики, ряд свойств частиц со спином может быть получен и без привлечения релятивистской теории, на основании общих квантовомеханических соображений и сравнительно небольшого числа экспериментальных фактов. Поскольку такая полуэмпирическая теория частиц со спином имеет достаточно простой характер и позволяет получить важные результаты, мы остановимся ниже на ее изложении.

Волновая функция частицы со спином будет зависеть не только от ее трех пространственных координат, но и от четвертой координаты, характеризующей внутреннее состояние частицы. В качестве последней можно выбрать величину проекции спина на произвольно ориентированную в пространстве ось z . Тогда волновую функцию можно написать в виде

$$\psi = \psi(x, s_z, t). \quad (60,1)$$

В отличие от пространственных координат x , «спиновая координата» имеет дискретный набор значений. Число

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi(x, -\frac{\hbar}{2}, t) \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (60,2)$$

При этом $|\psi_1|^2 dV$ мы можем интерпретировать как вероятность того, что в момент времени t электрон находится в элементе объема dV и имеет при этом проекцию спина на ось z , равную $\frac{\hbar}{2}$. $|\psi_2|^2 dV$ соответственно вероятность того, что у электрона, находящегося в том же элементе объема dV проекция спина на ось z равна $-\frac{\hbar}{2}$. Волновая функция $\psi(x, s_z, t)$ предполагается нормированной так, что

$$\sum_{s_z} \int |\psi(x, s_z, t)|^2 dV = 1,$$

где суммирование ведется по всем возможным значениям проекции спина s_z . Если вероятность той или иной проекции спина не зависит от координат частицы, то волновую функцию (60,2) можно переписать в виде

$$\psi = \psi(x, t) \varphi, \quad (60,3)$$

где $\psi(x, t)$ — обычная (координатная) и $\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ — спиновая волновые функции, c_1 и c_2 — некоторые числа. $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$ дают вероятности того, что проекция спина s_z равна соответственно $+\frac{\hbar}{2}$ и $-\frac{\hbar}{2}$.

В силу условия нормировки волновой функции имеем:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (60,4)$$

Определив понятие спиновой волновой функции, мы должны ввести действующие на нее операторы спина. В общем виде действие оператора на спиновую функцию $\varphi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ сводится к тому, что компоненты c_1 и c_2 заменяются на их некоторую линейную комбинацию

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 \end{pmatrix}. \quad (60,5)$$

$$\hat{a}\Psi = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 \end{pmatrix}. \quad (60,7)$$

Если разбиение волновой функции на координатную и спиновую составляющие недопустимо, то формула (60,7) перепишется в виде

$$\hat{a}\Psi = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}\psi_1 + a_{12}\psi_2 \\ a_{21}\psi_1 + a_{22}\psi_2 \end{pmatrix}. \quad (60,8)$$

Среднее значение оператора \hat{a} , взятое в состоянии Ψ , определяется согласно общей формуле (44,8):

$$\bar{a}(x, t) = \Psi^* a_{11} \psi_1 + \psi_1^* a_{12} \psi_2 + \psi_2^* a_{21} \psi_1 + \psi_2^* a_{22} \psi_2. \quad (60,9)$$

Это равенство можно переписать в матричной форме

$$\bar{a}(x, t) = \Psi^+ \hat{a} \Psi, \quad (60,10)$$

где Ψ^+ — матрица, состоящая из одной строки с элементами ψ_1^* и ψ_2^* :

$$\Psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^*). \quad (60,11)$$

Соотношение (60,10) определяет среднее значение величины a в момент времени t в данной точке пространства x . Если это выражение усреднить по всем положениям частицы, то мы получим

$$\bar{a}(t) = \int \Psi^+ \hat{a} \Psi dV. \quad (60,12)$$

Введем теперь операторы проекций спина \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z . В § 51 было показано, что вид этих операторов и все свойства спина могут быть получены, если за основу взяты перестановочные соотношения

$$\left. \begin{aligned} \hat{s}_x \hat{s}_y - \hat{s}_y \hat{s}_x &= i\hbar \hat{s}_z, \\ \hat{s}_y \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_y &= i\hbar \hat{s}_x, \\ \hat{s}_z \hat{s}_x - \hat{s}_x \hat{s}_z &= i\hbar \hat{s}_y. \end{aligned} \right\} \quad (60,13)$$

То обстоятельство, что операторы проекций спина должны удовлетворять тем же перестановочным соотношениям, что и опе-

связаны с операторами поворота, взаимодействующими, однако, уже не на координатную, а на спиновую функцию. Следствием коммутационных соотношений между операторами бесконечно малых вращений вокруг осей x , y , z и являются перестановочные соотношения (60,13). Приведенные соображения строго обосновываются методами теории групп¹⁾.

Из соотношений (60,13) следует аналогично (30,4)

$$\left. \begin{array}{l} \hat{s}_x \hat{s}^2 - \hat{s}^2 \hat{s}_x = 0, \\ \hat{s}_y \hat{s}^2 - \hat{s}^2 \hat{s}_y = 0, \\ \hat{s}_z \hat{s}^2 - \hat{s}^2 \hat{s}_z = 0. \end{array} \right\} \quad (60,14)$$

Таким образом, квадрат полного спина и одна из его проекций на произвольную ось могут быть измерены одновременно. Две проекции спина на разные оси одновременно не имеют определенных значений.

При $s = \frac{1}{2}$ матрицы спина $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ и его проекции на ось z в своем собственном представлении имеют вид (диагональные матричные элементы равны собственным значениям соответствующих операторов)

$$\hat{s}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z. \quad (60,15)$$

Матрицы \hat{s}_x , \hat{s}_y в этом представлении, согласно общей формуле (51,16), записутся так:

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x; \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y. \quad (60,16)$$

Матрицы σ_x , σ_y , σ_z , отличающиеся от матриц \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z постоянным множителем $\frac{\hbar}{2}$, носят название матриц Паули. Они удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i \sigma_z, \\ \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i \sigma_x, \\ \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i \sigma_y, \end{array} \right\} \quad (60,17)$$

паряду со сходством между орбитальным и спиновым моментами между ними существует принципиальное различие. В то время как орбитальный момент характеризуется квантовым числом l , могущим принимать любые целочисленные значения независимо от природы частицы, спиновое число s принимает ограниченный ряд значений, например $s = \frac{1}{2}$ для большинства элементарных частиц. При этом каждый вид элементарных частиц имеет свое характерное значение спина. Если совершить переход к классической механике, положив $\hbar \rightarrow 0$, то, как это было выяснено в § 41, следует одновременно перейти к пределу больших квантовых чисел. Поэтому, хотя по формуле (30,15) $l^2 = \hbar^2 l(l+1)$, из условия $\hbar \rightarrow 0$ еще не следует, что $l = 0$, так как одновременно с $\hbar \rightarrow 0$ следует положить $l \rightarrow \infty$. В случае спинового момента дело обстоит иначе. Поскольку s принимает лишь ограниченный ряд значений, переход к классической механике всегда приводит к значению спина $s = 0$. Мы видим, что в классической механике нет никакой величины, которая служила бы классическим аналогом спина. Спин — чисто квантовое понятие, характеризующее специфические свойства микрочастиц.

§ 61. Собственные функции операторов проекций спина частицы. Матрица поворота

Найдем собственные функции и собственные значения операторов \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z . Уравнение для собственных функций $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ и собственных значений s_x оператора \hat{s}_x имеет вид

$$\hat{s}_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Учитывая (60,16) и производя умножение, получаем

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} c_2 \\ \frac{\hbar}{2} c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_x c_1 \\ s_x c_2 \end{pmatrix}.$$

рассматривать двукратное отражение как поворот на угол 2π , а при таком повороте, как видно из формул (61,10), (61,13'), спинор меняет знак. Соответственно имеем:

$$\hat{I}^2 = \pm \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (61,22)$$

Мы видим, следовательно, что матрица \hat{I} должна коммутировать с матрицами \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z , а квадрат ее должен давать единичную матрицу, умноженную на ± 1 . Указанные требования будут выполнены при условии, что

$$\hat{I} = \pm \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ или } \hat{I} = \pm i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (61,23)$$

Следовательно, при отражении спинор может преобразоваться следующим образом:

$$\varphi' = \pm \varphi \quad (61,24)$$

или

$$\varphi' = \pm i\varphi. \quad (61,25)$$

Если закон преобразования определяется верхним знаком в формулах (61,24) и (61,25), то φ иногда называют полярным спинором, если нижним, то — псевдоспинором.

§ 62. Полный момент количества движения

Полный момент количества движения частицы складывается из орбитального и спинового моментов. По правилам сложения векторных операторов имеем для оператора полного момента \hat{j} :

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}. \quad (62,1)$$

Операторы орбитального и спинового моментов действуют на разные переменные. Первый — на пространственные переменные, второй — лишь на спиновые. Поэтому оба эти оператора

$$\left. \begin{array}{l} \hat{j}_y \hat{j}_z - \hat{j}_z \hat{j}_y = i\hbar \hat{j}_x, \\ \hat{j}_z \hat{j}_x - \hat{j}_x \hat{j}_z = i\hbar \hat{j}_y, \end{array} \right\} \quad (62,2)$$

а также

$$\left. \begin{array}{l} \hat{j}_x \hat{j}^2 - \hat{j}^2 \hat{j}_x = 0, \\ \hat{j}_y \hat{j}^2 - \hat{j}^2 \hat{j}_y = 0, \\ \hat{j}_z \hat{j}^2 - \hat{j}^2 \hat{j}_z = 0. \end{array} \right\} \quad (62,3)$$

Из соотношений (62,2) следует (см. § 51), что собственные значения оператора \hat{j}^2 имеют вид

$$\hat{j}^2 = \hbar^2 j(j+1). \quad (62,4)$$

Значение квантового числа j определяет величину полного момента количества движения. По правилам сложения моментов в квантовой механике (52,1) следует, что число j при заданных l и s пробегает ряд значений

$$j = |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s-1, l+s.$$

Квантовое число j принимает целые значения, если спин имеет целочисленное значение, и полуцелые, если спин полуцелый.

Покажем, что в случае частицы, движущейся в свободном пространстве или в центрально-симметричном поле, интегралом движения является именно полный момент количества движения. Для доказательства введем оператор поворота \hat{R} , учитывающий изменение как спиновых, так и пространственных координат волновой функции. Рассмотрим поворот системы координат вокруг оси z на некоторый малый угол $\delta\phi$. Исходя из результатов, полученных в §§ 30 и 61, легко определить изменение полной волновой функции при таком вращении:

$$\psi' = \hat{R}_z \psi = \hat{T}_z \hat{W}_z \psi = \left[1 + \frac{i}{\hbar} \delta\phi (\hat{s}_z + l_z) \right] \psi = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{j}_z \right) \psi.$$

Аналогичное соотношение имеет место, конечно, и для поворота вокруг любой другой оси. Мы видим, следовательно, что с оператором поворота связан именно оператор полного момента

место лишь приближенно при пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием.

Если мы имеем систему невзаимодействующих частиц, то полный момент количества движения всей системы $\hat{\mathbf{J}}$ складывается из моментов отдельных частиц $\hat{\mathbf{j}}_k$ по правилам сложения моментов в квантовой механике

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_k \hat{\mathbf{j}}_k. \quad (62,5)$$

Можно ввести также оператор орбитального момента количества движения $\hat{\mathbf{L}}$:

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_k \hat{\mathbf{l}}_k \quad (62,6)$$

и оператор полного спина системы $\hat{\mathbf{S}}$:

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_k \hat{\mathbf{s}}_k. \quad (62,7)$$

Так как $\hat{\mathbf{j}}_k = \hat{\mathbf{l}}_k + \hat{\mathbf{s}}_k$, то, очевидно, имеем

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (62,8)$$

Операторы, относящиеся к разным частицам, коммутируют между собой, так как они действуют на разные переменные. Поэтому для операторов проекций полных моментов $\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}$ имеют место такие же коммутационные соотношения, как и для операторов, относящихся к отдельным частицам. Например, для операторов проекций \hat{j}_x, \hat{j}_y полного момента имеем

$$\begin{aligned} \hat{j}_x \hat{j}_y - \hat{j}_y \hat{j}_x &= \sum_{k, l} (\hat{j}_{kx} \hat{j}_{ly} - \hat{j}_{ly} \hat{j}_{kx}) = \\ &= \sum_k (\hat{j}_{kx} \hat{j}_{ky} - \hat{j}_{ky} \hat{j}_{kx}) = i\hbar \sum_k \hat{j}_{kz} = i\hbar \hat{J}_z. \end{aligned}$$

Аналогичный результат имеет место для остальных проекций оператора $\hat{\mathbf{J}}$, а также для операторов $\hat{\mathbf{L}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$.

При заданных собственных значениях операторов, относя-

будет установлено точное релятивистское уравнение квантовой механики и показано, что уравнение Шредингера получается из него при предельном переходе $v/c \rightarrow 0$.

При этом оказывается, что если учитывать члены различного порядка малости, то в гамильтониане будут возникать дополнительные слагаемые, описывающие ряд важных свойств квантовых систем.

В частности, как самый факт существования спина, так и существования у электрона магнитного момента, вытекает из релятивистского волнового уравнения при разложении по степеням v/c и сохранения членов первого порядка малости.

Откладывая доказательство этого утверждения до § 118, введем оператор собственного магнитного момента, в соответствии с (59,4), соотношением

$$\hat{\mu} = \hat{as} = \frac{e}{mc} \hat{s}. \quad (63,1)$$

Тогда оператор Гамильтона для электрона в электромагнитном поле приобретает вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 + U(r) - \hat{\mu} \mathcal{H} = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 + U(r) - \frac{e}{mc} (\hat{s} \mathcal{H}), \end{aligned} \quad (63,2)$$

где \mathcal{H} — напряженность магнитного поля. Поскольку гамильтониан зависит от спина, волновая функция электрона также зависит от спиновой переменной, т. е. $\psi = \psi(x, y, z, t, s_z)$. Уравнение для волновой функции $\psi(x, y, z, t, s_z)$ в магнитном поле, впервые введенное Паули и носящее его имя, имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 \psi - \frac{e}{mc} (\hat{s} \mathcal{H}) \psi + U \psi. \quad (63,3)$$

Найдем вектор плотности потока вероятности. Для этого выпишем уравнение для функции ψ^+

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 \psi^+ - \frac{e}{mc} [(\hat{s} \mathcal{H}) \psi]^+ + U \psi^+. \quad (63,3')$$

Умножим (63,3) на ψ^+ слева, а (63,3') на ψ справа и вычтем одно из другого.

Учитывая, что $\hat{p} \hat{A} - \hat{A} \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla A$, после простых преобразова-

и, кроме того, $\hat{s}^+ = \hat{s}$ в силу эрмитовости оператора спина. Таким образом, слагаемое в квадратных скобках обращается в нуль и мы получаем выражение для вектора плотности потока вероятности. (Следует иметь в виду, что в него входят двухкомпонентные волновые функции.) Умножая его на заряд e , получаем вектор плотности электрического тока

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar e}{2m} ((\nabla\psi^+) \psi - \psi^+ \nabla\psi) - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A}\psi^+ \psi. \quad (63,6)$$

Выражение (63,4) определяет вектор плотности потока вероятности \mathbf{j} с точностью до $\text{rot } \mathbf{B}$, где \mathbf{B} — произвольный вектор. Можно показать, что $\mathbf{B} = \frac{e}{m} \psi^+ \hat{s} \psi$, так что полное выражение для плотности электрического тока будет иметь вид¹⁾

$$\mathbf{j}_n = -\frac{i\hbar e}{2m} (\psi^+ \nabla\psi - (\nabla\psi^+) \psi) - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} (\psi^+ \psi) + \frac{e}{m} \text{rot} (\psi^+ \hat{s} \psi). \quad (63,7)$$

Рассмотрим случай, когда частица движется в постоянном магнитном поле \mathcal{H} , а электрическое поле отсутствует. Векторный потенциал \mathbf{A} при этом можно выбрать в виде

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathcal{H} \times \mathbf{r}). \quad (63,8)$$

Преобразуем уравнение Паули (63,3), учитывая, что для вектора-потенциала (63,8) справедливо соотношение

$$\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}.$$

Кроме того, предполагаем, что магнитное поле \mathcal{H} достаточно слабо и в соответствии с этим опускаем в уравнении Паули члены, квадратичные по \mathcal{H} . Тогда имеем:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi - \frac{e}{2mc} (\mathcal{H} \times \mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}\psi - \frac{e}{mc} (\hat{s}\mathcal{H})\psi.$$

Так как

$$(\mathcal{H} \times \mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} = \mathcal{H} (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) = \mathcal{H} \hat{\mathbf{l}},$$

где $\hat{\mathbf{l}}$ — орбитальный момент количества движения, то

естественно назвать оператором орбитального магнитного момента (в отличие от $\hat{\mu}_s$ — оператора спинового магнитного момента).

Мы видим, что отношение орбитального магнитного момента $\hat{\mu}_l$ к механическому моменту \hat{l} , как и в классической физике, равняется $\frac{e}{2mc}$. Для спиновых моментов это отношение вдвое больше.

Уравнения (63,3) и (63,9) естественным образом обобщаются на случай системы частиц. Так, для системы частиц (с зарядом e , массой m), помещенных в слабое магнитное поле \mathcal{H} , уравнение Паули (63,9) имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \sum_k \hat{p}_k^2 \psi - \frac{e}{2mc} (\hat{L}\mathcal{H}) \psi - \frac{e}{mc} (\hat{S}\mathcal{H}) + U_{\text{вз}} \psi, \quad (63,10)$$

где $\hat{L} = \sum_k \hat{l}_k$ — оператор полного орбитального, а $\hat{S} = \sum_k \hat{s}_k$ — полного спинового моментов системы (суммирование ведется по всем частицам системы), $U_{\text{вз}}$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц между собой.

Не представляет труда учесть и член квадратичный по магнитному полю. Уравнение Паули в этом случае имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m} \sum_k \hat{p}_k^2 - \frac{e}{2mc} (\hat{L} + 2\hat{S}) \mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_k [\mathcal{H} r_k]^2 + U_{\text{вз}} \right\} \psi. \quad (63,11)$$

Мы увидим, что в некоторых случаях (см. § 75) квадратичный член играет существенную роль.

Если магнитное поле отсутствует и потенциальная энергия взаимодействия $U_{\text{вз}}$ не зависит от спинов частиц, например при кулоновском взаимодействии заряженных частиц, то гамильтониан системы не содержит спиновых переменных. В этом случае

и антисимметричные состояния

Мы перейдем теперь к построению волновой функции системы частиц одного рода, например системы электронов, протонов, фотонов и т. п.

В таких системах проявляются новые важные особенности, не имеющие аналога в классической механике системы частиц. Эти особенности станут ясны из сравнения процесса соударения двух частиц — макроскопических и микроскопических.

В классической механике свойства каждой частицы характеризуются одной величиной — ее массой. Если массы обеих частиц равны, то частицы можно считать совершенно одинаковыми. Состояние каждой из частиц в момент $t = 0$ задается начальными условиями.

Двигаясь по определенным траекториям, частицы упруго сталкиваются в некоторой точке пространства и расходятся по соответствующим траекториям.

Если заданы начальные условия, то траектории каждой частицы полностью определены и за движением каждой частицы можно проследить. Поэтому в классической механике частицы, хотя бы и одинаковые, сохраняют свою индивидуальность. Всегда можно определить, какая именно из сталкивающихся частиц попала в данную точку пространства.

Совершенно иначе тот же процесс столкновения происходит с двумя микрочастицами. Пусть в момент соударения обе частицы находились в определенных точках пространства. При этом, согласно соотношению неопределенности, их импульсы не имели определенного значения. После соударения мы можем зафиксировать «траектории» частиц, например два следа в камере Вильсона. Ясно, однако, что если обе сталкивающиеся частицы были одной природы, — например сталкивались два электрона или два протона, — то какая именно из этих частиц связана с данным следом, установить принципиально невозможно.

В качестве второго примера рассмотрим систему, состоящую из двух атомов водорода.

Если атомы находятся на достаточно больших расстояниях друг от друга, так, что электронные облака не перекрываются, то каждый электрон практически локализован в своего ядра.

Приведенные примеры показывают, что однаковость квантовых частиц имеет гораздо более глубокую природу, чем «одинаковость» классических частиц. Квантовые частицы не просто одинаковы, но совершенно тождественны.

Если мы захотели бы изменить начальное состояние системы, заменив один электрон на другой, в системе не произошло бы никаких физических изменений, никаким физическим опытом невозможно обнаружить эту замену.

Необходимо подчеркнуть также, что в приведенных примерах мы несколько схематизировали ситуацию. Если, например, обе сталкивающиеся частицы имеют определенные значения импульсов, они не имеют никаких определенных значений координаты. Поэтому нельзя даже указать область столкновения.

Таким образом, мы приходим к принципу тождественности частиц, который можно сформулировать следующим образом: в системе тождественных частиц осуществляются лишь такие состояния, которые не меняются при перестановке местами любых двух тождественных частиц.

Тождественность микрочастиц приводит к весьма важным и глубоким следствиям. Напомним, что мы столкнулись уже с этим свойством микрочастиц в статистической физике. Сейчас мы более последовательно разберем, как тождественность частиц влияет на свойства их коллектива.

Рассмотрим систему, состоящую из N тождественных частиц. Волновая функция такой системы ψ будет иметь вид

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N, t).$$

Здесь под ξ_i понимается вся совокупность координат и спиновых переменных, характеризующих i -ю частицу.

Если переставить между собой две частицы, т. е. заменить координаты и спин i -й частицы соответствующими величинами для k -й частицы и наоборот, то в силу принципа тождественности состояние системы не может измениться. Следовательно, волновая функция системы может измениться лишь на несущественный фазовый множитель.

После перестановки двух частиц волновую функцию можно выразить через исходную соотношением

— другим словам, проводя первую операцию (6.1), мы можем записать:

$$\begin{aligned}\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N, t) &= \\ = e^{ia} \psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N, t) &= \\ = e^{2ia} \psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N, t).\end{aligned}$$

Отсюда следует, что $e^{2ia} = 1$ и

$$e^{ia} = \pm 1.$$

Таким образом, при перестановке двух тождественных частиц волновая функция системы может или не измениться совсем, или изменить знак на обратный. Волновые функции первого типа называются симметричными, волновые функции второго типа — антисимметричными. Введем важный для дальнейшего оператор перестановок или обменный оператор \hat{P}_{ik} . По определению при воздействии оператора \hat{P}_{ik} на волновую функцию системы частиц $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N, t)$ он переводит ее в новую функцию

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ik}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N, t) &= \\ = \psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N, t). \quad (64,2)\end{aligned}$$

Этой замене соответствует переход i -й частицы в состояние ранее занятое k -й частицей, а k -й частицы — в состояние i -й частицы.

Сравнивая (64,2) с (64,1), мы видим, что собственные значения оператора \hat{P}_{ik} равны $e^{ia} = \pm 1$. При этом симметричные и антисимметричные функции являются собственными функциями оператора \hat{P}_{ik} , отвечающими собственным значениям соответственно $+1$ и -1 .

С помощью оператора перестановки покажем, что свойства симметрии сохраняются во времени. Это означает, что если система в первоначальный момент времени находилась в симметричном или антисимметричном состоянии, то никакое последующее воздействие не изменяет характера ее симметрии. Иными словами, система все время будет оставаться либо в симметричном, либо в антисимметричном состоянии. Для доказательства

Здесь $U_{12}(\xi_1, \xi_2, t)$ — энергия взаимодействия частиц, а U отвечает взаимодействию с внешним полем и имеет, очевидно, для двух тождественных частиц одинаковый вид. При перестановке частиц для нового гамильтониана имеем:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + U(\xi_2, t) + U(\xi_1, t) + U_{12}(\xi_2, \xi_1, t). \quad (64,4)$$

Совершенно ясно, что это тот же гамильтониан, что и до перестановки. Полученный результат без труда переносится на случай системы из N частиц. Мы видим, что перестановка частиц не изменяет гамильтониан. Поэтому получаем

$$\hat{H} \hat{P}_{ik} - \hat{P}_{ik} \hat{H} = 0. \quad (64,5)$$

Следовательно, свойства симметрии системы являются интегралом движения и сохраняются во времени.

Таким образом, естественно думать, что симметрия определяется свойствами самих элементарных частиц, которые составляют систему. Удалось показать, что частицы, обладающие целым спином, описываются симметричными функциями, а частицы с полуцелым спином — антисимметричными функциями. Первые частицы называют частицами Бозе — Эйнштейна или бозонами, вторые — частицами Ферми — Дирака (или фермionами). К первой группе частиц относятся: кванты света (см. гл. XII), π -мезоны и др. Ко второй: нейтроны, протоны, позитроны, электроны, нейтрино, μ -мезоны (у всех спин $1/2$) и др.

Для выяснения вопроса о свойствах симметрии системы, состоящей из тождественных сложных частиц, следует определить полный спин сложной частицы. Так же как и в случае элементарных частиц, волновая функция при целом спине сложной частицы симметрична при перестановке местами сложных частиц и антисимметрична при полуцелом спине сложной частицы.

В виде примера рассмотрим систему, состоящую из α -частиц. Для определения свойств симметрии волновой функции системы необходимо подсчитать полный спин α -частицы. α -частица со-

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

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

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

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

Здесь k_1, k_2, \dots — квантовые числа состояний, в которых могут находиться частицы. Каждое k_i представляет собой полный набор квантовых чисел, характеризующих состояние отдельной частицы. Функции ψ_{k_i} 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:

$$\Psi_s = C_1 [\psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2) + \psi_2(\xi_1) \psi_1(\xi_2)],$$

$$\Psi_a = C_2 [\psi_1(\xi_1) \psi_1(\xi_2) - \psi_2(\xi_1) \psi_2(\xi_2)].$$

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

Поэтому нормированные и симметризованные функции можно написать в виде

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

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

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

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

где суммирование ведется по всем возможным перестановкам разных индексов $k_1 \dots k_N$. 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 $\sum_i n_i = N$. 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 $\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}$. Аналогично, для системы фермионов получаем

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\xi_1) & \dots & \psi_{k_1}(\xi_N) \\ \psi_{k_2}(\xi_1) & \dots & \psi_{k_2}(\xi_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_N}(\xi_1) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (65,6)$$

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

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 обращается 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 антикоммутации, согласно которому для любых двух частиц i и j имеем

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

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

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

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

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

Средняя энергия системы в этом состоянии равна

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

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

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

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

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

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 $\psi_n(r_1, s_{1z}, r_2, s_{2z})$ зависит от пространственных и спиновых координат обеих частиц и антисимметрична в этих переменных. Предполагая, что внешнее магнит-

проекции на ось z каждой из частиц, т. е. функций $\Phi_{\frac{1}{2}}(1)$, $\Phi_{-\frac{1}{2}}(1)$, $\Phi_{\frac{1}{2}}(2)$, $\Phi_{-\frac{1}{2}}(2)$, где индекс означает проекцию спина на ось z , а число в скобках — номер частицы.

В самом общем виде функцию φ можно записать так:

$$\begin{aligned}\varphi(1, 2) = & c_1 \Phi_{\frac{1}{2}}(1) \Phi_{\frac{1}{2}}(2) + c_2 \Phi_{-\frac{1}{2}}(1) \Phi_{-\frac{1}{2}}(2) + \\ & + c_3 \Phi_{\frac{1}{2}}(1) \Phi_{-\frac{1}{2}}(2) + c_4 \Phi_{-\frac{1}{2}}(1) \Phi_{\frac{1}{2}}(2),\end{aligned}\quad (66,2)$$

где c_1 , c_2 , c_3 и c_4 — произвольные амплитуды.

Определим спиновые волновые функции, описывающие состояния с заданным полным спином системы и его проекцией на ось z .

Так как спины складываются по общим правилам сложения моментов (см. § 52), то полный спин системы из двух частиц принимает два значения $S = 1$ и $S = 0$. Его проекция на ось z соответственно имеет значения 1, 0 и -1 при $S = 1$ и $S_z = 0$ при $S = 0$ (в единицах \hbar).

Функции φ , описывающие состояние с заданными S и S_z , удовлетворяют уравнениям

$$\left. \begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}^2 \varphi &= \hbar^2 S(S+1) \varphi, \\ \hat{S}_z \varphi &= \hbar S_z \varphi,\end{aligned}\right\} \quad (66,3)$$

где $\hat{\mathbf{S}} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$ — оператор полного спина системы. Коэффициенты c_1 , c_2 , c_3 и c_4 в спиновой функции системы (66,2) должны быть подобраны так, чтобы оба уравнения (66,3) для φ были автоматически удовлетворены.

Непосредственной проверкой нетрудно убедиться, что спиновая функция системы, отвечающая всем указанным условиям, может быть написана в виде¹⁾

$$\left. \begin{aligned}\varphi_1^1 &= \Phi_{\frac{1}{2}}(1) \Phi_{\frac{1}{2}}(2), \quad S = 1, \quad S_z = 1, \\ \varphi_0^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{\frac{1}{2}}(1) \Phi_{-\frac{1}{2}}(2) + \Phi_{-\frac{1}{2}}(1) \Phi_{\frac{1}{2}}(2)], \quad S = 1, \quad S_z = 0, \\ \varphi_{-1}^1 &= \Phi_{-\frac{1}{2}}(1) \Phi_{-\frac{1}{2}}(2), \quad S = 1, \quad S_z = -1,\end{aligned}\right\} \quad (66,4)$$

$$\varphi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{\frac{1}{2}}(1) \Phi_{-\frac{1}{2}}(2) - \Phi_{-\frac{1}{2}}(1) \Phi_{\frac{1}{2}}(2)], \quad S = 0, \quad S_z = 0,\quad (66,5)$$

изменяются при перестановке местами первой и второй частиц, т. е. при замене $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$. Следовательно, эти функции симметричны в спинах частиц. Спиновая функция (66,5) изменяет знак при такой перестановке и является антисимметричной в спинах.

Спиновые функции (66,4) образуют спиновый триплет. Совокупность трех компонент триплета эквивалентна трехкомпонентной спиновой функции частицы со спином единица. Спиновая функция (66,5), описывающая состояние со спином, равным нулю, образует спиновый синглет.

Определим собственные значения скалярного произведения $(\hat{s}_1 \hat{s}_2)$ в синглетном и триплетном состояниях. С этим произведением нам придется иметь дело в дальнейшем. Поскольку

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2(\hat{s}_1 \hat{s}_2),$$

то

$$(\hat{s}_1 \hat{s}_2) = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2). \quad (66,6)$$

Подставляя в правую часть собственные значения операторов $\hat{\mathbf{S}}^2$, \hat{s}_1^2 и \hat{s}_2^2 , имеем:

$$(\hat{s}_1 \hat{s}_2) \varphi^s = \frac{\hbar^2}{2} \left(S(S+1) - \frac{3}{2} \right) \varphi^s. \quad (66,7)$$

Для триплетного состояния $S = 1$ и

$$(\hat{s}_1 \hat{s}_2) \varphi^1 = \frac{1}{4} \hbar^2 \varphi^1. \quad (66,8)$$

Соответственно для синглетного состояния $S = 0$

$$(\hat{s}_1 \hat{s}_2) \varphi^0 = -\frac{3}{4} \hbar^2 \varphi^0. \quad (66,9)$$

Рассмотрим теперь функцию от пространственных переменных $\Phi(r_1, r_2)$. Так как полная волновая функция (66,1) антисимметрична, то координатная волновая функция будет антисимметричной в состоянии $S = 1$ и симметричной в состоянии $S = 0$. Если частицы не взаимодействуют и находятся в некоторых состояниях ψ_1 и ψ_2 , то координатная функция имеет вид

координатам $\Phi(r_1, r_2) = \psi_0(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$.
ответственно движение центра тяжести системы и относительное движение частиц,

$$\Phi(r_1, r_2) = \psi_0(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}). \quad (66,12)$$

Выясним, к каким следствиям приводит требование симметрии или антисимметрии волновой функции (66,12). Заметим прежде всего, что если потенциал взаимодействия частиц зависит только от расстояния между ними, $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, то в такой системе сохраняется орбитальный момент количества движения, связанный с относительным движением частиц (см. § 35). Приведем теперь перестановку координат частиц $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1$. При такой перестановке радиус-вектор центра тяжести \mathbf{R} не изменяется. Следовательно, не изменяется и волновая функция $\psi_0(\mathbf{R})$. Радиус-вектор относительного движения \mathbf{r} меняет знак $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. Если орбитальный момент, связанный с относительным движением частиц, задан и определяется квантовым числом l , то закон преобразования функции $\psi(\mathbf{r})$ при замене \mathbf{r} на $-\mathbf{r}$, как мы выяснили в § 33, будет:

$$\psi(-\mathbf{r}) = (-1)^l \psi(\mathbf{r}). \quad (66,13)$$

Мы видим, что в этом случае координатная волновая функция (66,12) при перестановке частиц $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{r}_1$ преобразуется по закону

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow (-1)^l \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (66,14)$$

Из (66,14) сразу следует, что если частицы находятся в триплетном состоянии $S = 1$, то квантовое число l может принимать лишь нечетные значения. Наоборот, число l может принимать лишь четные значения, если частицы находятся в синглетном состоянии $S = 0$.

§ 67. Обменное взаимодействие и понятие о химическом и сильном ядерном взаимодействиях

Тождественность квантовых частиц приводит к фундаментальному изменению представления о взаимодействии между частицами.

сто очевидное соотношение

$$(\Delta q_1 \Delta p_1)^3 \sim d^3 (\Delta p_1)^3 \sim \hbar^3,$$

где $\Delta q_1 \sim d$ — неопределенность координаты частицы и $\Delta p_1 \sim \frac{\hbar}{d}$ — неопределенность ее импульса.

Согласно принципу Паули вторая частица не может попасть в ту же ячейку фазового пространства. Поэтому она должна либо находиться на расстоянии, большем d , от первой частицы, либо иметь импульс p_2 , превышающий Δp_1 , т. е. импульс $p_2 > \frac{\hbar}{d}$. Только при этом условии она может подойти к первой частице на расстояние, меньшее чем d , и попасть при этом в другую клетку фазового пространства.

Мы видим, что частицы с параллельными спинами не могут подойти друг к другу, если только они не обладают достаточно большим импульсом относительного движения. Такое поведение частиц эквивалентно появлению некоторых сил отталкивания между ними. Если спины частиц антипараллельны, предыдущее рассуждение теряет силу, поскольку принцип Паули не запрещает таким частицам находиться в одной ячейке фазового пространства.

Таким образом, из принципа Паули, налагающего ограничения на состояния частиц, вытекает факт существования взаимодействия между частицами, зависящего от ориентации их спинов.

Взаимодействие между бозонами не может быть проиллюстрировано на столь же наглядном примере. Тем не менее ясно, что требование симметризации волновой функции соответствует определенной зависимости энергии системы частиц от ее полного спина, т. е. приводит ко взаимодействию между частицами.

Предположим теперь, что между двумя частицами со спином $1/2$ имеется некоторое слабое взаимодействие, описываемое оператором $\hat{H}'(r_{12})$, где r_{12} — расстояние между частицами. Для наглядности, а также имея в виду дальнейшие приложения, допустим, что \hat{H}' представляет кулоновское отталкивание двух зарядов $\hat{H}'(r_{12}) = \frac{e^2}{r_{12}}$. Тогда средняя энергия взаимодействия

Так как, по предположению, в нулевом приближении частицы считаются невзаимодействующими, то спиновые и координатные волновые функции разделяются, причем последние записываются симметризованными или антисимметризованными произведениями (66,10) и (66,11).

Подставляя значение оператора \hat{H}' и волновые функции в (67,1), имеем

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_{n_1}(1)\psi_{n_2}(2) \pm \psi_{n_1}(2)\psi_{n_2}(1)|^2 dV_1 dV_2 = \\ = e^2 \int \frac{|\psi_{n_1}(1)|^2 |\psi_{n_2}(2)|^2}{r_{12}} dV_1 dV_2 \pm e^2 \int \frac{\psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1)}{r_{12}} dV_1 dV_2,$$

где цифры 1 и 2 обозначают координаты соответственно первого и второго электронов, а r_{12} — расстояние между ними. Знаки + и — относятся к состоянию частиц, соответственно симметричному и антисимметричному относительно перестановки частиц. В этой формуле проведено суммирование по спиновым переменным, которое дало единицу. Мы воспользовались, кроме того, очевидным равенством

$$\int \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) dV_1 dV_2 = \\ = \int \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{n_1}^*(2) \psi_{n_2}^*(1) dV_1 dV_2.$$

В последнем равенстве один интеграл переходит в другой при замене индексов интегрирования 1 на 2.

Вводя обозначения

$$C = \int |\psi_{n_1}(1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_{n_2}(2)|^2 dV_1 dV_2 = \\ = \int |\psi_{n_1}(1)|^2 \hat{H}'(r_{12}) |\psi_{n_2}(2)|^2 dV_1 dV_2, \quad (67,2)$$

$$A = \int \left\{ \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) \right\} dV_1 dV_2 = \\ = \int \{ \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) \hat{H}'(r_{12}) \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) \} dV_1 dV_2, \quad (67,3)$$

напишем энергию взаимодействия (67,1) в виде

чаю кулоновского взаимодействия, а это мы уже получили для любой энергии взаимодействия, зависящей от координат частиц.

Интересно сравнить этот результат с аналогичным вычислением для двух частиц различной природы. Тогда мы написали бы для несимметризованной волновой функции $\Psi = \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2)$ и соответственно получили бы:

$$E' = \int |\psi_{n_1}|^2 |\psi_{n_2}|^2 \frac{e^2}{r_{12}} dV_1 dV_2. \quad (67,6)$$

Формула (67,6) имеет простой смысл — она представляет среднее значение энергии кулоновского отталкивания двух частиц. Положение одной из частиц, находящейся в состоянии n_1 , характеризуется плотностью вероятности $|\psi_{n_1}(1)|^2$, второй — $|\psi_{n_2}(2)|^2$.

В формулах (67,4) и (67,5) интеграл C имеет структуру, аналогичную (67,6) и часто называется кулоновским интегралом. Однако, строго говоря, он не допускает подобной интерпретации, так как нельзя указать, какая из тождественных частиц находится в состоянии n_1 , а какая — в состоянии n_2 .

Интеграл A , именуемый обычно обменным (нем. Austausch — обмен), не имеет каких-либо классических аналогов. Расчеты, проведенные для конкретных систем, показывают, что интегралы C и A всегда положительны. Из формул (67,4) и (67,5) непосредственно следует, что поправка к средней энергии, обусловленная взаимодействием частиц, зависит от ориентации их спинов.

Подчеркнем прежде всего, что было бы неправильным считать взаимодействие складывающимся из двух частей — классической и обменной, как это часто делают для наглядности. При этом классической частью взаимодействия называют вклад в энергию, определяемый кулоновским интегралом C , а обменной — соответствующий вклад от обменного интеграла A . В действительности разделить взаимодействие на две части невозможно, поскольку сама величина A не допускает классической интерпретации.

Наиболее характерная часть обменного взаимодействия выражается интегралом A (67,3). Этот интеграл можно трактовать как матричный элемент, соответствующий переходу пер-

A можно представить как

$$A = \int \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) \hat{H}_{12} \psi_{n_1}(2) \psi_{n_2}(1) dV_1 dV_2 = \\ = \int \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) \hat{H}_{12} \hat{P}_{12} \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) dV_1 dV_2. \quad (67,7)$$

Таким образом, обменное взаимодействие отвечает замене оператора \hat{H}_{12} на оператор $\hat{H}_{12} \hat{P}_{12}$. Полная энергия взаимодействия с помощью обменного оператора может быть записана в виде

$$E' = C \pm A = \int \psi_{n_1}^*(1) \psi_{n_2}^*(2) (\hat{H}_{12} \pm \hat{H}_{12} \hat{P}_{12}) \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) dV_1 dV_2. \quad (67,7')$$

Мы видим, что тождественность квантовомеханических частиц существенно изменяет их взаимодействие. Если различные по своей природе частицы обладают произвольным взаимодействием, характеризующимся оператором \hat{H}_{12} , то в случае тождественных частиц оператор этого взаимодействия должен быть заменен на $\hat{H}_{12} \pm \hat{H}_{12} \hat{P}_{12}$. Этот вывод не зависит от природы взаимодействия, т. е. от характера оператора \hat{H}_{12} . Так электрическое взаимодействие двух тождественных частиц (например, двух позитронов) происходит иначе, чем такое же электрическое взаимодействие различных частиц (например, позитрона и протона).

Таким образом, специфика тождественных частиц, состояние которых характеризуется симметризованными волновыми функциями, приводит к важнейшему общему следствию: состояние системы оказывается зависящим от суммарного спина системы.

Это обстоятельство является количественным выражением тех качественных соображений, которые были приведены в начале параграфа.

Зависимость энергии системы частиц от полного спина эквивалентна утверждению о существовании взаимодействия между частицами. Это взаимодействие получило название обменного.

Обменное взаимодействие имеет специфически квантовый характер. Формально это следует из того факта, что в классическом пределе спин системы обращается в нуль (ср. § 60). Поскольку в квантовом и классическому пределу исчезает всякое

соответствующего уравнения Шредингера.

Физическим состояниям системы и определенным значениям ее энергии отвечают только те из них, которым отвечает симметричная в частицах волновая функция. В случае двух бозонов со спином 1 энергия системы также оказывается зависящей от полного спина.

Результаты, полученные для системы, состоящей из двух частиц — фермионов или бозонов, — непосредственно переносятся на общий случай систем с произвольным числом тождественных частиц.

Возвращаясь к примеру с взаимодействием двух электронов, покажем, что обменные силы допускают следующую наглядную, хотя и не строгую интерпретацию: предположим, что в момент времени $t = 0$ первый электрон находился в состоянии n_1 , а второй — в состоянии n_2 . Необходимо еще раз подчеркнуть, что в действительности такая формулировка относится к моменту $t = 0$ и дальнейшие рассуждения служат лишь для придания наглядности эффекту обменного взаимодействия. Тогда начальная волновая функция имеет вид

$$\Phi(0) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(t=0) + \psi_s(t=0)] = \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2).$$

Состояния, описываемые симметричной ψ_s и антисимметричной ψ_a волновой функцией, являются стационарными состояниями с энергиями соответственно

$$E_s = E + C + A, \quad E_a = E + C - A.$$

Поэтому зависимость волновых функций ψ_s и ψ_a от времени дается формулами

$$\psi_s = \psi_s(0) e^{-\frac{i}{\hbar} (E+C+A) t}, \quad \psi_a = \psi_a(0) e^{-\frac{i}{\hbar} (E+C-A) t}.$$

Полная волновая функция $\Phi(t)$ при $t > 0$ является их суперпозицией и, следовательно, не описывает стационарного состояния

$$\begin{aligned} \Phi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_s(t) + \psi_a(t)) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{n_1}(1) \psi_{n_2}(2) + \psi_{n_2}(1) \psi_{n_1}(2) \right\} e^{-\frac{i}{\hbar} (E+C+A) t} + \end{aligned}$$

ния n_2 , то по прошествии промежутка времени

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{2A} \quad (67,9)$$

электроны обмениваются состояниями. Волновая функция

$$-i\psi_{n_2}(1)\psi_{n_1}(2)e^{-\frac{i}{\hbar}(E+C)t}$$

отвечает нахождению первого электрона в состоянии n_2 , а второго — в состоянии n_1 . По прошествии промежутка времени 2τ они возвращаются в начальные состояния и т. д. Таким образом, электроны обмениваются состояниями с периодом τ .

Часто такой обмен состояниями наглядно представляют следующим образом: один из электронов системы вылетает, например, из атома и поглощается другим атомом. Из последнего в свою очередь вылетает электрон, переходящий в первый атом. В процессе «вылета» и «захвата» электронов происходит изменение импульса соответствующих атомов. Изменение импульса атомов означает, что между ними имеется некоторое взаимодействие. Это схематическое и наглядное рассмотрение обменного взаимодействия оправдывает термин «обмен». Однако его не следует понимать буквально.

Это особенно ясно видно из следующего рассуждения: пусть состояния n_1 и n_2 отвечают связанным состояниям электронов в двух атомах. Если бы мы попытались понимать описанный выше процесс обмена буквально, в классическом смысле, то возникло бы противоречие. Действительно, электроны не смогли бы обмениваться состояниями или «вылетать» и «захватываться» атомами, так как для этого они должны были бы получать извне некоторую энергию, превышающую энергию их связи в атомах. В действительности каждый из двух атомов, между которыми имеет место обменное взаимодействие, не находится в состоянии с определенной энергией. Неопределенность энергии системы ΔE имеет порядок $\Delta E \sim A$. Не имеет смысла говорить о постоянстве энергии в течение промежутка времени τ — времени обмена, равного по порядку величины

$$\Delta E \Delta t \sim A\tau \sim \hbar.$$

При этом система не находится в состоянии с опреде-

а не действительный характер. Слово виртуальный означает, что непосредственный смысл имеют только начальное и конечное состояния системы.

Для того чтобы обменный интеграл A имел отличные от нуля значения, волновые функции частиц Ψ_{n_1} и Ψ_{n_2} должны достаточно сильно перекрываться, т. е. быть отличными от нуля в одной и той же области пространства. Если, напротив, волновые функции Ψ_{n_1} и Ψ_{n_2} отличны от нуля в различных областях пространства, то обменный интеграл обращается в нуль. Если, в частности, Ψ_{n_1} и Ψ_{n_2} — волновые функции, описывающие связанные состояния электронов в различных атомах, то обменное взаимодействие возможно лишь при непосредственном сближении атомов. Пусть, далее, волновые функции отвечают двум связанным состояниям в атоме. Например, n_1 — нормальное, а n_2 — одно из возбужденных состояний. Тогда величина обменного интеграла чрезвычайно быстро уменьшается с переходом к высшим возбужденным состояниям, когда состояния n_1 и n_2 обладают существенно различными энергиями. Наконец, когда речь идет о взаимодействии свободных частиц, описываемых плоскими волнами, то обменный интеграл отличен от нуля только для частиц, имеющих близкие по величине значения импульсов. Если, например, импульсы частиц заметно отличаются друг от друга, а энергия взаимодействия изменяется с координатами сравнительно медленно, то в A под интегралом содержится произведение плавно изменяющейся и быстроосцилирующей функции. При этом весь интеграл мал. Таким образом, заметное обменное взаимодействие может иметь место лишь для тождественных частиц, находящихся в близких состояниях — локализованных в малой области пространства или имеющих близкие значения энергии и импульса.

Из этого свойства обменного взаимодействия вытекает важнейшее следствие: обменное взаимодействие обладает свойством насыщения, так что в системе из большого числа N тождественных частиц полная энергия обменного взаимодействия пропорциональна числу частиц N . Действительно, две частицы, связанные обменным взаимодействием, например два электрона с антипараллельными спинами, не могут присоединить к себе третьей частицы.

видно, $\frac{1}{2}$.

В заключение укажем на следующее обстоятельство: вывод формул для энергии взаимодействия был проведен в предположении, что оператор взаимодействия не содержит величин, зависящих от спина частиц. Однако к таким же результатам можно прийти и в том случае, когда оператор взаимодействия содержит операторы спинов.

Обменное взаимодействие между тождественными частицами играет важнейшую роль в природе.

Достаточно указать, что обменный характер имеют силы, обусловливающие существование гомеополярной химической связи, взаимодействие, ответственное за образование кристаллов, явление ферромагнетизма и, наконец, взаимодействие между частицами в атомных ядрах — ядерные силы. К проблеме химической связи мы вернемся еще в § 79, а пока кратко остановимся на проблеме ядерных сил.

До настоящего времени не удалось создать последовательную теорию ядерных сил. Построение этой теории является одной из центральных задач современной теоретической физики. Пока теория ядерных сил имеет полуэмпирический характер и основана на ряде опытных фактов. Совокупность имеющихся фактов позволила установить следующие свойства ядерного взаимодействия:

1. Опыты с рассеянием нейтронов на протонах показали, что на расстояниях от $1 \cdot 10^{-13}$ см до $2 \cdot 10^{-13}$ см между ядерными частицами действуют весьма мощные силы притяжения. Эти силы быстро спадают с расстоянием и не проявляются заметным образом на расстояниях, больших $2 \cdot 10^{-13}$ см. На весьма малых расстояниях, меньших $1 \cdot 10^{-13}$ см, притяжение, по-видимому, заменяется отталкиванием.

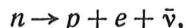
2. Ядерные силы оказываются не зависящими от заряда частиц, т. е. ядерные силы, действующие между двумя протонами, нейтроном и протоном и двумя нейтронами, равны между собой. Зарядовая независимость ядерных сил вытекает как из прямых опытов по рассеянию быстрых нейтронов и протонов на протонах, так и из анализа свойств так называемых зеркальных ядер. Под зеркальными ядрами понимают ядра, отличающиеся

Поэтому, согласно современной точке зрения, протон и нейtron следует рассматривать как разные зарядовые состояния одной частицы — нуклона.

Нуклон имеет спин $\frac{1}{2}$ и в данном зарядовом состоянии подчиняется принципу запрета Паули. Ядерное взаимодействие между нуклонами получило название сильного взаимодействия (см. § 112).

3. Нуклон может находиться в двух различных зарядовых состояниях — протонном и нейтронном, между которыми возможны переходы.

При свободном движении протонное состояние с меньшей массой и энергией является более устойчивым. Поэтому происходит распад свободного нейтрана по схеме



где $\bar{\nu}$ — антинейтрино.

В атомных ядрах, где имеет место ядерное взаимодействие между частицами, происходит взаимное превращение нейтронов и протонов (см. ниже).

4. Наличие у протонов заряда влечет за собой два следствия: 1) протонное и нейтронное состояния являются разными состояниями нуклона. 2) Между двумя протонами наряду с ядерным взаимодействием действуют силы кулоновского отталкивания. Они становятся существенными у тяжелых ядер, обусловливая их нестабильность.

5. Ядерное взаимодействие зависит не только от расстояния, но и от взаимной ориентации спинов взаимодействующих частиц, а также от ориентации спинов относительно оси, соединяющей оба нуклона.

Зависимость ядерного взаимодействия от ориентации спинов следует непосредственно из опытов по рассеянию весьма медленных нейтронов на орто- и параводороде.

Существование зависимости от ориентации спинов относительно оси вытекает из анализа свойств дейтрана, в частности наличия у него квадрупольного момента.

6. Ядерное взаимодействие имеет обменный характер. Этот фундаментальный вывод следует, прежде всего, из самого факта стабильности ядер.

должно было бы сжиматься, а частицы сливаться друг с другом. Объем ядра был бы постоянной величиной, не зависящей от A , а его энергия связи — пропорциональной A^2 . В действительности данные по рассеянию показывают, что объем ядра растет пропорционально A , а энергия связи — также пропорциональна A . Это значит, что ядерные силы обладают свойством насыщения. Насыщение, как мы видели выше, является характерной особенностью обменных сил.

Остановимся несколько подробнее на изложении современных представлений о природе ядерных сил.

Из допущения о том, что протон и нейtron являются состояниями одной частицы, и из обменного характера нуклонного взаимодействия вытекает следующая наглядная картина ядерных сил: между двумя нуклонами, находящимися на весьма малых расстояниях, происходит виртуальный обмен некоторой частицей, являющейся «переносчиком» взаимодействия. Этот обмен частицей в принципе сходен с виртуальным обменом электроном в подробно разобранном выше примере обменного взаимодействия.

Оказалось (см. ниже), что частицей, ответственной за нуклон-нуклонное взаимодействие, является π -мезон.

Именно, возможны три типа обмена:

$$p \rightleftharpoons n + \pi^+,$$

$$n \rightleftharpoons p + \pi^-,$$

$$\begin{aligned} p &\rightleftharpoons p + \pi^0, \\ n &\rightleftharpoons n + \pi^0. \end{aligned}$$

В первых двух виртуальных процессах нуклон переходит из протонного в нейтронное состояние и обратно; в последнем зарядовое состояние нуклона не изменяется. Наглядно процесс обмена заряженным мезоном можно трактовать так же, как обмен электронами: часть времени каждый из нуклонов проводит в заряженном состоянии, часть времени — в нейтральном. Обмен виртуальными π -мезонами обусловливает притяжение между нуклонами. Мы подчеркивали виртуальный характер обмена, поскольку для образования реальных мезонов потребовалась

может зависеть лишь от массы частиц — переносчиков и первоначальных и конечных состояний.

Из указанных трех величин можно составить только одну постоянную размерности длины — комптоновскую длину волны мезона

$$R \sim \frac{\hbar}{m_\pi c}. \quad (67,10)$$

Выражению (67,10) можно придать наглядный смысл на основе следующих рассуждений: при виртуальном обмене мезоном энергия каждого из двух нуклонов должна обладать неопределенностью $\Delta E \sim m_\pi c^2$. Время обмена τ должно иметь порядок $\tau \sim \frac{\hbar}{m_\pi c^2}$. Если считать, что мезон движется со скоростью $\sim c$, то за время τ он проходит путь

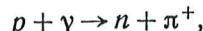
$$R \sim c\tau \sim \frac{\hbar}{m_\pi c}.$$

Это расстояние и есть радиус действия ядерных сил. Задаваясь радиусом действия ядерных сил, можно найти массу частиц — переносчиков

$$m_\pi \sim \frac{\hbar}{Rc} \simeq 300 m_{эл},$$

где $m_{эл}$ — масса электрона. Это по порядку величины совпадает со значением масс π -мезонов. Заметим, что π -мезоны были обнаружены экспериментально после введения их в теорию как гипотетических частиц, ответственных за сильное ядерное взаимодействие. Наиболее убедительным доказательством того, что именно π -мезоны являются переносчиками ядерных сил, служит установленный на опыте факт чрезвычайно сильного взаимодействия π -мезонов с нуклонами.

При энергиях системы нуклонов, превышающих $m_\pi c^2$, возможно реальное возникновение π -мезонов. Оно наблюдалось как при столкновении быстрых нуклонов, так и при воздействии на нуклоны γ -лучей. Наблюдалась реакция



представляющая элементарный акт ядерного фотоэффекта. В дальнейшем, в частности, в § 112, мы вернемся еще к про-