

Министерство общего и профессионального образования
Российской Федерации

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Радиофизический факультет

Квантовая механика

Учебное пособие

Нижний Новгород
2007 год

Содержание

1	Глава 9 : Преобразования симметрии в квантовой механике.	3
1.1	§9.1 Введение. Определение симметрии.	3
1.2	§9.2 Необходимые и достаточные признаки симметрии.	4
1.3	§9.3 Микроскопическая обратимость во времени в квантовой механике.	5
1.4	§9.4 Бесконечно малые преобразования симметрии. Законы сохранения в квантовой механике.	6
1.5	§9.5 Трансляционная симметрия и классификация спектров кристаллических тел.	7
1.6	§9.6 Теорема Блоха.	9
2	Глава 10 : Принцип тождественности.	11
2.1	§10.1 Принцип тождественности частиц и его физические следствия. .	11
2.1.1	Неразличимость частиц и принцип неопределённости.	11
2.1.2	Неразличимость частиц и принцип суперпозиции.	11
2.1.3	Симметрия системы относительно перестановок одинаковых частиц. Операторы перестановок частиц как динамические переменные.	12
2.1.4	Закон сохранения чётности в квантовой механике. Постулат симметрии.	13
2.2	§10.2 Частицы Бозе и частицы Ферми. Принцип Паули.	14
2.3	§10.3 Газ Ферми-Дирака и газ Бозе-Эйнштейна.	15

1 Глава 9 : Преобразования симметрии в квантовой механике.

1.1 §9.1 Введение. Определение симметрии.

Руководящей идеей в современной квантовой физике является симметрия. Из соображений симметрии выводятся новые уравнения, строятся новые теории. Например, так называемая калибровочная симметрия положена в основу современной теории сильных взаимодействий (поля Янга и Милза). Из симметрии физических систем следуют законы сохранения. В квантовой физике существуют специфические свойства симметрии, не имеющие классического аналога, а потому имеются принципиально следующие из симметрии квантовые закономерности. Например, принцип тождественности одинаковых частиц. Понятие симметрии в физике, и особенно в квантовой, приобретает принципиальную значимость. Чтобы дать определение симметрии в физике, обратимся к известному и важному **принципу относительности и специальной теории относительности**. В основе принципа относительности лежит утверждение: **Все инерциальные системы отсчёта физически эквивалентны**, т.е. все физические закономерности одинаковы в любой инерциальной системе координат. Иначе говоря, уравнения движения при переходе от одной инерциальной системы отсчёта к другой должны выглядеть одинаково. Ньютон принцип относительности допускает бесконечно большую скорость распространения взаимодействий, в чём противоречит релятивистскому принципу, говорящему, что **предельная скорость распространения взаимодействия конечна и равна скорости света c в вакууме в любой инерциальной системе координат**. Современное рассмотрение симметрии в квантовой механике невозможно без учёта релятивистских закономерностей.

Дадим определение симметрии в физике.

Определение : Симметрия физической системы есть инвариантность её уравнений движения относительно определённого класса преобразований (преобразований симметрии).

Наша задача сейчас - рассмотреть особенности преобразований симметрии в квантовой физике.

1.2 §9.2 Необходимые и достаточные признаки симметрии.

Рассмотрим математическую формулировку преобразований симметрии.

Введём некоторый оператор $\hat{\mathbf{T}}$, который действует на любое состояние системы φ по правилу:

$$\hat{\mathbf{T}}\varphi = \varphi',$$

где φ' - новое состояние системы.

И потребуем, чтобы обратное преобразование $\hat{\mathbf{T}}^{-1}$ переводило систему обратно в исходное состояние, т.е.

$$\hat{\mathbf{T}}^{-1}\varphi' = \varphi.$$

Таким образом, из этих соотношений следует, что $\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{T}}^{-1} = \hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{1}$, т.е. произведение $\hat{\mathbf{T}}$ и $\hat{\mathbf{T}}^{-1}$ есть тождественное преобразование.

Все операции в квантовой механике инвариантны относительно этого преобразования. Рассмотрим оператор $\hat{\mathbf{A}} : \hat{\mathbf{A}}\varphi = \chi$ и подействуем на это выражение оператором $\hat{\mathbf{T}}$:

$$\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{A}}\varphi = \hat{\mathbf{T}}\chi = \chi'$$

Если на систему ещё подействовать тождественным оператором $\hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{T}}$, то получаем такое выражение:

$$\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{T}})\varphi = (\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{T}}^{-1})\hat{\mathbf{T}}\varphi = \hat{\mathbf{T}}\chi$$

Обозначим оператор $\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{T}}^{-1} = \hat{\mathbf{A}}'$ и тогда получим выражение:

$$\hat{\mathbf{A}}'\varphi' = \chi'$$

Таким образом, любое соотношение между физическими величинами после преобразования $\hat{\mathbf{T}}$ не меняет вид:

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{C}} \Rightarrow \hat{\mathbf{A}}'\hat{\mathbf{B}}' = \hat{\mathbf{C}}'.$$

Найдём класс преобразований, которые оставляют без изменения измерения. Для этого выясним вид оператора, при котором амплитуда вероятности оставалась бы без изменений. Потребуем, чтобы $(\varphi, \psi) = (\varphi', \psi')$. Подробнее рассмотрим (φ', ψ') :

$$(\varphi', \psi') = (\hat{\mathbf{T}}\varphi, \hat{\mathbf{T}}\psi) = (\varphi, \hat{\mathbf{T}}^+\hat{\mathbf{T}}\psi) = (\varphi, \psi)$$

Из рассмотренного соотношения вытекает, что данное преобразование оставляет амплитуду вероятности неизменной, если $\hat{\mathbf{T}}^+\hat{\mathbf{T}}$ равен единичному оператору, т.е.

$$\hat{\mathbf{T}}^+ = \hat{\mathbf{T}}^{-1}.$$

А это есть унитарное преобразование.

При унитарном преобразовании эрмитовый оператор переходит в эрмитовый. Покажем это. Пусть $\hat{\mathbf{A}}$ - эрмитовый оператор. Докажем, что после унитарного преобразования $\hat{\mathbf{A}}'$ тоже будет эрмитовым оператором. Здесь $\hat{\mathbf{A}}' = \hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{T}}^{-1}$. То есть нужно доказать тот факт, что если $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^+$, то после преобразования должно получиться $\hat{\mathbf{A}}' = (\hat{\mathbf{A}}')^+$.

$$(\hat{\mathbf{A}}')^+ = (\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{T}}^{-1})^+ = \hat{\mathbf{T}}^+\hat{\mathbf{A}}^+(\hat{\mathbf{T}}^{-1})^+ = \hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{A}}.$$

Унитарное преобразование $\hat{\mathbf{T}}$ есть преобразование симметрии данной физической системы, если после преобразования не меняются уравнения физической системы.

Будем исходить из уравнения Шрёдингера:

$$\boxed{ih\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \hat{\mathbf{H}}\Psi(t)} \quad (\blacktriangleleft)$$

Определим класс преобразований $\hat{\mathbf{T}} : \hat{\mathbf{T}}\Psi = \Psi'$, не меняющих это уравнение, т.е. нужно посмотреть, при каких условиях преобразование $\hat{\mathbf{T}}$ переводит уравнение Шрёдингера для вектора Ψ в уравнение такого же вида только для вектора Ψ' .

Для этого подействуем на уравнение Шрёдингера оператором $\hat{\mathbf{T}}$:

$$\hat{\mathbf{T}}ih\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{H}}\Psi,$$

$$\left(\hat{\mathbf{T}}ih\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathbf{T}}^{-1}\right)\hat{\mathbf{T}}\Psi = \left(\hat{\mathbf{T}}ih\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathbf{T}}^{-1}\right)\hat{\mathbf{T}}\Psi' \equiv \left(\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{T}}^{-1}\right)\Psi' = \left(\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{T}}^{-1}\right)\hat{\mathbf{T}}\Psi.$$

Таким образом, у нас есть два условия (необходимое и достаточное), при выполнении которых преобразование $\hat{\mathbf{T}}$ есть преобразование симметрии:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{T}}ih\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathbf{T}}^{-1} = ih\frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow \Rightarrow \left[\hat{\mathbf{T}}, ih\frac{\partial}{\partial t}\right] &= 0; \\ \hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{T}}^{-1} = \hat{\mathbf{H}} \Rightarrow \Rightarrow \left[\hat{\mathbf{T}}, \hat{\mathbf{H}}\right] &= 0. \end{aligned}$$

1.3 §9.3 Микроскопическая обратимость во времени в квантовой механике.

Введём оператор $\hat{\mathbf{\Theta}}$ обращения во времени, действующий по закону:

$$\hat{\mathbf{\Theta}}\Psi(t) = \Psi(-t).$$

Вектор Ψ комплексный, и мы можем ввести оператор $\hat{\mathbf{K}}$ комплексного сопряжения:

$$\hat{\mathbf{K}}\Psi = \Psi^+.$$

Запишем новый оператор $\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{\Theta}}\hat{\mathbf{K}}$. И теперь, если к оператору $\hat{\mathbf{T}}$ применить необходимое и достаточное условия, то он будет считаться преобразованием симметрии. А отсюда следует, что уравнения движения инвариантны относительно обращения во времени.

Таким образом, все физические величины делятся на два класса: которые меняют знак при обращении во времени (скорость, импульс) и которые не меняют (координата, кинетическая энергия).

1.4 §9.4 Бесконечно малые преобразования симметрии. Законы сохранения в квантовой механике.

Пусть \hat{T} не содержит обращения во времени и является преобразованием симметрии. Представим, что есть сколь угодно малое значение ε ($\varepsilon > 0$), которое определяет \hat{T} :

$$\hat{T}_\varepsilon = e^{i\hat{A}\varepsilon},$$

где \hat{A} - эрмитовый оператор.

Если разложить значение оператора \hat{T}_ε в ряд, то получится:

$$\hat{T}_\varepsilon = 1 + i\hat{A}\varepsilon + \dots,$$

т.е. преобразование отличается от тождественного на бесконечно малую величину. \hat{T}_ε - унитарное преобразование и для него выполняется два условия симметрии, отсюда следует, что \hat{T}_ε - преобразование симметрии.

Рассмотрим теорему.

Теорема: Если имеется сколь угодно малое преобразование симметрии, то имеется сохранение величины \mathbf{A} .

Доказательство:

$$\left[\hat{T}_\varepsilon, \hat{H}\right] = 0 \Rightarrow \left[\hat{T}_\varepsilon, \hat{H}\right] = \left[e^{i\hat{A}\varepsilon}, \hat{H}\right] = i\varepsilon \left[\hat{A}, \hat{H}\right] = 0 \Rightarrow \left[\hat{A}, \hat{H}\right] = 0.$$

Имеет место также обратная теорема.

Теорема обратная: Пусть \mathbf{A} - интеграл движения, тогда мы можем построить унитарный оператор симметрии.

Доказательство:

$$\left[\hat{A}, \hat{H}\right] = 0 \Rightarrow \hat{T}_\varepsilon = 1 + i\hat{A}\varepsilon = e^{i\hat{A}\varepsilon} \Rightarrow \left[\hat{T}_\varepsilon, \hat{H}\right] = 0.$$

Рассмотрим примеры.

Пусть имеется замкнутая система, в которой интегралами движения являются энергия \mathbf{H} , обобщённый импульс \mathbf{P} , момент количества движения \mathbf{J} . Тогда мы можем сделать вывод о том, что время в системе однородно, а пространство однородно и изотропно.

Покажем это.

1. \mathbf{H} - интеграл движения и $t \rightarrow t' = t + \delta t \Rightarrow \hat{T}_{\delta t} = 1 + \frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t}$ - преобразование симметрии, т.е.

$$\hat{T}_{\delta t}\Psi(t) = \Psi(t + \delta t) \Rightarrow$$

однородность по времени;

2. \mathbf{P} - интеграл движения и $r \rightarrow r' = r + \delta r \Rightarrow \hat{T}_{\delta r} = 1 + \frac{i}{\hbar}\mathbf{P}\delta r = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{P}\delta r}$ - преобразование симметрии, т.е.

$$\hat{T}_{\delta r}\Psi(r) = \Psi(r + \delta r) \Rightarrow$$

однородность в пространстве;

3. \mathbf{J} - интеграл движения и $\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi + \delta\varphi \Rightarrow \hat{\mathbf{T}}_{\delta\varphi} = 1 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \delta\varphi = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \delta\varphi}$ - преобразование симметрии, т.е.

$$\hat{\mathbf{T}}_{\delta\varphi} \Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + \delta\varphi) \Rightarrow$$

изотропность в пространстве.

А теперь рассмотрим, как используется симметрия для решения конкретных задач.

1.5 §9.5 Трансляционная симметрия и классификация спектров кристаллических тел.

Вся квантовая механика инвариантна относительно унитарных операторов. Некоторые из них оставляют инвариантными уравнения движения. Эти операторы есть преобразования симметрии. Симметрия в физике есть симметрия уравнений движения. Пусть уравнение движения следующее:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}} \Psi$$

Учитывая, что оператор $\hat{\mathbf{T}}$ есть преобразование симметрии, подействуем им на наше уравнение:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}} \Psi',$$

где $\Psi' = \hat{\mathbf{T}} \Psi$. То есть уравнение движения не изменилось.

Если преобразование симметрии (оператор $\hat{\mathbf{T}}$) не затрагивает время, то симметрия этой физической системы означает инвариантность гамильтониана системы, т.е.:

$$\hat{\mathbf{H}}' = \hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{T}}^{-1} = \hat{\mathbf{H}} \Rightarrow \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{H}} \Rightarrow [\hat{\mathbf{T}}, \hat{\mathbf{H}}] = 0.$$

Это свойство преобразований симметрии лежит в основе решения основополагающей задачи квантовой механики - определения спектра значений энергии физической системы :

$$\boxed{\hat{\mathbf{H}} \Psi = \varepsilon \Psi} \quad (1)$$

Если операторы $\hat{\mathbf{H}}$ и $\hat{\mathbf{T}}$ коммутируют, то они имеют общую систему собственных функций:

$$\hat{\mathbf{T}} \Psi_k = \alpha_k \Psi_k \quad (2)$$

Определение спектра собственных значений α_k и собственных векторов Ψ_k оператора симметрии $\hat{\mathbf{T}}$ значительно проще, нежели решение задачи (1). В то же время, решение задачи (1) при решении задачи (2) упрощается. Из условия равенства нулю коммутатора $[\hat{\mathbf{T}}, \hat{\mathbf{H}}] = 0$, следует, что операторы $\hat{\mathbf{T}}$ и $\hat{\mathbf{H}}$ имеют общую систему собственных функций.

В качестве собственных функций $\hat{\mathbf{H}}$ следует брать собственные вектора оператора $\hat{\mathbf{T}}$ - Ψ_k :

$$\hat{\mathbf{H}}\Psi_k = \varepsilon_k \Psi_k,$$

где ε_k аналогичны собственным числам α_k .

Далее мы рассмотрим фундаментальную задачу о классификации спектров кристаллических тел. Это центральная задача физики кристаллических тел. Кристаллические тела обладают повышенной симметрией в физике. Для них характерен определённый порядок в кристалле. В противовес кристаллическим имеются аморфные тела, у которых нет какого-либо строго определённого порядка в расположении ядер. В идеальном кристалле наиболее вероятные положения ядер - узлы решётки, периодически повторяются в пространстве, образуя кристаллическую решётку.

Все спектры энергии возбуждения кристалла определяются трансляционной симметрией.

Рассмотрим простейшую ситуацию одномерного кристалла. Состояние системы определяется уравнением Шрёдингера:

$$\hat{\mathbf{H}}\Psi = \varepsilon\Psi.$$

Введём оператор симметрии $\hat{\mathbf{T}}_a$ (кристалл не меняется при трансляции на период решётки a), т.е.:

$$\hat{\mathbf{T}}_a\Psi(x) = \Psi(x + a).$$

А так как оператор трансляции и гамильтониан коммутируют, т.е. $[\hat{\mathbf{T}}_a, \hat{\mathbf{H}}] = 0$, следовательно, они имеют полную систему общих собственных векторов:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{T}}_a\Psi_k(x) = \alpha_k\Psi_k(x); \\ \hat{\mathbf{H}}\Psi_k(x) = \varepsilon_k\Psi_k(x). \end{cases}$$

Нужно найти собственные вектора и собственные значения оператора симметрии $\hat{\mathbf{T}}_a$ для того, чтобы подставить их в уравнение Шрёдингера и найти оттуда спектр энергии $\varepsilon(k)$ в кристалле.

Обратим внимание на то, что $\Psi_k(x)$ - комплексная функция, и поэтому её можно представить в виде:

$$\Psi(x) = U(x)e^{i\varphi(x)},$$

где $U(x), \varphi(x)$ - действительные функции.

Рассмотрим, чему равна плотность вероятности $W(x)$:

$$W(x) = |\Psi(x)|^2 = |U(x)|^2 = W(x + a),$$

так как трансляция на вектор не меняет кристалл. Это возможно тогда и только тогда, когда $U(x)$ - периодическая функция, т.е. $U(x) = U(x + a)$.

Мы ищем решение в виде:

$$\Psi_k(x) = U_k(x)e^{i\varphi_k(x)}.$$

Подставляем это решение в уравнение $\hat{\mathbf{T}}_a \Psi_k(x) = \alpha_k \Psi_k(x)$:

$$\hat{\mathbf{T}}_a \Psi_k(x) = U_k(x+a)e^{i\varphi_k(x+a)} = U_k(x)e^{i\varphi_k(x+a)} = \alpha_k \Psi_k(x).$$

Отсюда следует, что $\alpha_k = e^{i(\varphi_k(x+a) - \varphi_k(x))}$.

Представим $\varphi_k(x)$ в виде ряда:

$$\varphi_k(x) = \varphi^0 + kx,$$

в определённой системе отсчёта можно задать $\varphi^0 = 0$.

Подставляя значение $\varphi_k(x)$ в выражение для собственного значения оператора трансляции $\hat{\mathbf{T}}_a$, получаем:

$$\alpha_k = e^{ika},$$

$$\Psi_k(x) = U_k(x)e^{ikx},$$

где k - действительное число, a - период решётки.

$\alpha_k = \alpha(k)$ - функция периодическая:

$$\alpha(k) = e^{ika} = \alpha\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) = \alpha(k + K),$$

где $K = \frac{2\pi}{a}$ - вектор обратной решётки.

Квантовое число k можно задать в пределах этого периода: $0 < k \leq \frac{2\pi}{a}$, называемого элементарной ячейкой обратной решётки.

Таким образом, собственное значение оператора трансляции есть периодическая функция с периодом обратной решётки. Это есть фундаментальное свойство.

Исходя из этого, можно сделать вывод, что энергия в кристалле тоже периодическая функция с периодом обратной решётки:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon\left(k + \frac{2\pi}{a}\right).$$

При данном значении k могут быть, вообще говоря, несколько значений энергии $\varepsilon_1(k), \varepsilon_2(k)$.

1.6 §9.6 Теорема Блоха.

Сделаем некоторые выводы из рассмотренного выше.

Одна из важнейших задач квантовой теории - нахождение спектра значений энергии квантовой системы. Свойства квантовой системы задаются её гамильтонианом $\hat{\mathbf{H}}$. $\hat{\mathbf{H}}$ - есть оператор энергии квантовой системы. Поэтому, спектр значений энергии находится из решения уравнения:

$$\hat{\mathbf{H}}\Psi = \varepsilon\Psi \quad (1)$$

Спектр значений ε может быть дискретным, (например, для гармонического осциллятора частоты ω : $\varepsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$); а также непрерывным и дискретно-непрерывным.

Особенности спектра значений энергии квантовой системы определяются её симметрией, точнее преобразованиями симметрии. Преобразования симметрии не меняют свойств квантовых систем, не меняют, в частности, спектр значений энергии. Поэтому свойства симметрии могут быть использованы для нахождения спектра. Чем выше симметрия квантовой системы, тем больше можно извлечь из неё. Решение задачи (1) начинают с исследования симметрии системы.

Преобразование симметрии в случае одномерного кристалла, рассмотренного в предыдущем параграфе, заключается в трансляции на период решётки a . Мы ввели оператор трансляции $\hat{\mathbf{T}}_a$:

$$\hat{\mathbf{T}}_a \Psi(x) = \Psi(x + a)$$

и коммутатор $[\hat{\mathbf{T}}_a, \hat{\mathbf{H}}] = 0$.

Трансляционная симметрия означает, что трансляция кристалла как единого целого на любой вектор решётки x_n не меняет физических свойств кристалла. При трансляционной симметрии в кристалле состояние описывается формулами Блоха, которые определяются произвольной периодической функцией и выражаются через период решётки или через квазиимпульс:

$$\Psi_k(x) = U_k(x) e^{ikx}$$

или

$$\Psi_p(x) = U_p(x) e^{ipx}.$$

Функция Блоха $\Psi_p(x, t)$ запишется так:

$$\boxed{\Psi_p(x, t) = U_p(x) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \varepsilon_p t)}} \quad (\blacktriangleleft)$$

Учтём тот факт, что энергия в кристалле есть периодическая функция $\varepsilon_l(p) = \varepsilon_l(p + \frac{2\pi}{a}\hbar)$ и чётная относительно обращения во времени $\varepsilon_l(p) = \varepsilon_l(-p)$.



2 Глава 10 : Принцип тождественности.

2.1 §10.1 Принцип тождественности частиц и его физические следствия.

В классической теории понятия неразличимости частиц (или тождественности) строго говоря не существует, а одинаковость частиц не приводит к каким-либо физическим последствиям. Однако в квантовой теории в силу принципа неопределённости, принципа суперпозиции одинаковость частиц приводит к важнейшим физическим следствиям и приобретает фундаментальный характер.

Понятие частицы в квантовой механике кардинально отличается от классического. Принцип тождественности раскрывает специфически квантовую сущность частиц. Наиболее фундаментальна полевая точка зрения на частицы. Согласно этой точке зрения мир состоит из определённого сорта частиц – полей. Поэтому одинаковые частицы как кванты возбуждения соответствующего поля в принципе не различимы, что означает тождественность частиц. Практически это означает, что перестановка частиц местами не может привести к каким-либо наблюдаемым изменениям. Физически это одно и то же квантовое состояние. Частицы могут как исчезать, так и рождаться в процессе взаимодействия. Неразличимость частиц в квантовой физике выступает как принцип с далеко идущими последствиями.

2.1.1 Неразличимость частиц и принцип неопределённости.

Принципиальная неразличимость одинаковых квантовых частиц вытекает из принципа неопределённости.

В классике, несмотря на одинаковость частиц, неявно подразумевается их индивидуальность, так как, согласно классическим представлениям, за каждой частицей можно проследить (подсмотреть). Если одинаковые частицы находятся в одном и том же фазовом объёме, то пронумеровать квантовые частицы невозможно в силу принципа неопределённости. Представим себе частицы, разнесённые в пространстве, сближаются настолько, что попадают в один фазовый объём. При этом они теряют свою индивидуальность – становятся неразличимыми.

2.1.2 Неразличимость частиц и принцип суперпозиции.

Ещё более глубокое отличие квантовой и классической одинаковости частиц следует из важнейшего принципа квантовой механики – принципа суперпозиции.

Представим себе, что имеется два источника одинаковых частиц и происходит рассеивание этих частиц. Пусть Ψ_1 - есть амплитуда вероятности того, что первая частица переходит в состояние с P'_1 , а вторая – в состояние с P'_2 :

$$\Psi_1 : \begin{cases} P_1 \Rightarrow P'_1 \\ P_2 \Rightarrow P'_2 \end{cases}$$

Однако, в силу одинаковости частиц, имеется ещё одна возможность. Первая частица перейдёт в состояние с P'_2 , а вторая – в состояние с P'_1 :

$$\Psi_2 : \begin{cases} P_1 \Rightarrow P'_2 \\ P_2 \Rightarrow P'_1 \end{cases}$$

Мы не можем сказать, где будет после рассеивания первая частица, а где вторая. С точки зрения принципа суперпозиции возникает своеобразная квантовая интерференция двух физически неразличимых альтернатив:

$$\boxed{C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2}$$

2.1.3 Симметрия системы относительно перестановок одинаковых частиц. Операторы перестановок частиц как динамические переменные.

Рассмотрим сначала систему, состоящую из двух одинаковых частиц. Обозначим через ξ – полный набор переменных, характеризующих состояние отдельной частицы.

Тогда волновую функцию двух частиц запишем в виде:

$$\Psi = \Psi(\xi_1, \xi_2)$$

Соответственно, гамильтониан системы будет зависеть одновременно от ξ_1 и ξ_2 :

$$\hat{H} = \hat{H}(\xi_1, \xi_2)$$

Тождественность квантовых частиц означает, что их перестановки физически не наблюдаемы. Следовательно, гамильтониан системы двух тождественных частиц имеет симметрию, то есть он не зависит от порядка следования частиц:

$$\boxed{\hat{H}(\xi_1, \xi_2) = \hat{H}(\xi_2, \xi_1)} \quad (\blacktriangleleft)$$

Сформулируем это свойство симметрии математически. С этой целью определим оператор \hat{Y}_{12} , который действует на состояние следующим образом:

$$\begin{cases} \hat{Y}_{12}\Psi(\xi_1, \xi_2) = \Psi(\xi_2, \xi_1) \\ \hat{Y}_{12}\Psi(\xi_2, \xi_1) = \Psi(\xi_1, \xi_2) \end{cases} \quad (*)$$

Оператор \hat{Y}_{12} переставляет частицы 1 и 2 местами и носит название оператора перестановки частиц.

Свойство (\blacktriangleleft) означает симметрию \hat{H} и \hat{Y}_{12} :

$$\left[\hat{Y}_{12}, \hat{H} \right] = 0 \quad (\blacktriangleleft\blacktriangleleft)$$

Далее будем рассматривать свойства оператора перестановки \hat{Y}_{12} как некоторой специфичной квантовой динамической переменной.

Из (*) следует, что квадрат оператора перестановки есть единичный оператор:

$$\hat{Y}_{12}^2 = \hat{I}$$

С помощью этого свойства можно легко находить собственные значения Υ и собственные состояния Υ_{12} .

Дадим определение чётных и нечётных состояний.

$$\begin{aligned}\Upsilon_{12}\varphi(\xi_1, \xi_2) &= \Upsilon\varphi(\xi_1, \xi_2) \\ \hat{\Upsilon}_{12}^2\varphi(\xi_1, \xi_2) &= \Upsilon^2\varphi(\xi_1, \xi_2) = \varphi(\xi_1, \xi_2)\end{aligned}$$

то есть $\Upsilon^2 = 1$, то $\Upsilon = \pm 1$.

Если $\Upsilon = 1$, то состояние чётное:

$$\varphi^s(\xi_1, \xi_2) = \varphi^s(\xi_2, \xi_1)$$

если же $\Upsilon = -1$, то состояние нечётное:

$$\varphi^a(\xi_1, \xi_2) = -\varphi^a(\xi_2, \xi_1)$$

2.1.4 Закон сохранения чётности в квантовой механике. Постулат симметрии.

Если оператор динамической переменной коммутирует с гамильтонианом, то такая переменная сохраняется. Следовательно, из коммутативности оператора перестановки $\hat{\Upsilon}_{12}$ с гамильтонианом \hat{H} следует закон сохранения чётности (симметрии относительно перестановки).

Если в некоторый момент времени система из двух частиц имела определённую чётность ($\Upsilon = \pm 1$), то эта чётность обязана сохраняться и в последующие моменты времени. Причём никакое взаимодействие не сможет разрушить эту чётность.

Будем рассматривать $\hat{\Upsilon}_{12}$ как оператор некоторой новой динамической переменной. Назовём $\hat{\Upsilon}_{12}$ оператором чётности. Из условия:

$$[\hat{H}, \hat{\Upsilon}_{12}] = 0$$

следует, что чётность сохраняется.

Напомним особенности квантовых законов сохранения. Физическая величина – интеграл движения не всегда обязательно имеет определённое значение. В квантовой теории сохраняются вероятности измерений физической величины.

В нашем случае закон сохранения чётности означает, что если в некоторый момент времени:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = C_1\varphi^s(\xi_1, \xi_2) + C_2\varphi^a(\xi_1, \xi_2),$$

то

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, t) = C_1\varphi^s(\xi_1, \xi_2, t) + C_2\varphi^a(\xi_1, \xi_2, t)$$

Из закона сохранения чётности не следует чётность или нечётность состояния. Но, если в какой-то момент времени состояние было чётным, то согласно закону сохранения – оно должно оставаться чётным и в последующие моменты времени.

$$\begin{cases} \varphi^s(\xi_1, \xi_2) \Rightarrow \varphi^s(\xi_1, \xi_2, t) \\ \varphi^a(\xi_1, \xi_2) \Rightarrow \varphi^a(\xi_1, \xi_2, t) \end{cases} \quad (\blacktriangleleft)$$

Закон сохранения чётности это особый тип симметрии физических систем. В природе существует два сорта частиц:

— Бозе-частицы, описание которых можно провести чётной функцией относительно перестановки любой пары частиц $\Upsilon = +1$.

— Ферми-частицы, описание которых можно провести нечётной функцией относительно перестановки любой пары частиц $\Upsilon = -1$.

2.2 §10.2 Частицы Бозе и частицы Ферми. Принцип Паули.

Квантовая механика на основе принципа тождественности одинаковых частиц ведёт к двум классам состояний, абсолютно не смешивающимися между собой. Поэтому выбор того или иного класса состояний для какой-либо системы частиц может быть продиктован только природой частиц, образующих систему, а не характером внешнего поля или каким-либо подобным обстоятельством.

Опытным путём установлено, что в природе существуют частицы, принадлежащие обоим классам. При этом наблюдается следующее правило: частицы, обладающие спином, равным целому числу постоянных Планка:

$$s = hm, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

описываются симметричными функциями Ψ_s . Будем называть такие частицы частицами Бозе, а совокупности таких частиц – ансамблями Бозе-Эйнштейна, по имени физиков, разработавших статистику для таких частиц.

Напротив, частицы, имеющие спин, равный полуцелому числу постоянных Планка:

$$s = hm, \quad m = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

описываются антисимметричными функциями Ψ_a . Мы будем называть такие частицы частицами Ферми, а совокупность таких частиц ансамблями Ферми-Дирака.

Все простейшие "элементарные" частицы обладают спином 0, 1/2 или 1.

Спином 1/2 обладают электроны, протоны, нейтроны, гипероны, μ -мезон, нейтрино и их античастицы. Поэтому они все являются частицами Ферми ("фермионами").

Спин 0 имеют π -мезоны и K-мезоны – они являются частицами Бозе ("бозонами").

Единственная элементарная частица со спином 1 есть фотон. Он также подчиняется статистике Бозе.

Принадлежность сложной системы, например атома и ядра, к тому или иному классу частиц будет определяться числом и классом более простых частиц, из которых образована сложная система.

Обратимся теперь к рассмотрению основной особенности частиц типа Ферми. Эта фундаментального значения особенность заключается в том, что частицы этого рода подчиняются так называемому принципу Паули, который ещё задолго до разработки квантовой механики был сформулирован Паули на основании анализа эмпирических данных о спектрах сложных атомов.

Принцип (в элементарной форме) утверждает, что в данной системе в одном и том же квантовом состоянии не может находиться более одного электрона.

В более общей форме принцип Паули гласит: в системе электронов в каждый момент времени при измерении любых четырёх величин L_1, L_2, L_3, s , характеризующих состояние отдельного электрона, каждое значение четвёрки величин L_1, L_2, L_3, s может быть получено только для одного электрона системы.

Эмпирически установленный принцип Паули есть следствие принципа тождественности частиц в квантовой механике. Частицы, описываемые антисимметричными волновыми функциями (частицы Ферми), подчиняются принципу Паули.

2.3 §10.3 Газ Ферми-Дирака и газ Бозе-Эйнштейна.

В классической кинетической теории предполагается, что вероятность перехода частиц в результате столкновения из некоторого состояния n и n' (энергии частиц ε_n и $\varepsilon_{n'}$) в другое состояние m и m' (энергии частиц ε_m и $\varepsilon_{m'}$) пропорциональна числам частиц в начальных состояниях N_n и $N_{n'}$. На основании квантовой механики мы должны для газа, состоящего из одинаковых частиц, сделать другое предположение о среднем числе переходов под влиянием столкновений. Вероятность перехода зависит не только от числа частиц в исходных состояниях, но и от степени населённости конечных состояний. В случае частиц Ферми имеем:

$$P_{mm'nn'} = A_{mm'nn'}(1 - N_m)(1 - N_{m'})N_nN_{n'},$$

где $N_m, N_{m'}, N_n, N_{n'} = 1$ или 0 . В этой формуле явно выражен принцип Паули: если одно из конечных состояний занято $N_m = 1$ или $N_{m'} = 1$, то перехода быть не может. Подобным образом для частиц Бозе:

$$P_{mm'nn'} = A_{mm'nn'}(1 + N_m)(1 + N_{m'})N_nN_{n'}$$

Запишем формулу о среднем числе столкновений частиц в общем виде:

$$\bar{P}_{mm'nn'} = A_{mm'nn'}(1 \pm \bar{N}_m)(1 \pm \bar{N}_{m'})\bar{N}_n\bar{N}_{n'},$$

причём знак "−" берут для частиц Ферми, а знак "+" для частиц Бозе.

Найдём теперь распределение по энергиям при тепловом равновесии в газе частиц Бозе или Ферми. При тепловом равновесии число переходов в состояния n и n' в результате столкновения частиц, находившихся в состоянии i , должно равняться числу обратных переходов:

$$(1 \pm \bar{N}_m)(1 \pm \bar{N}_{m'})\bar{N}_n\bar{N}_{n'} = (1 \pm \bar{N}_n)(1 \pm \bar{N}_{n'})\bar{N}_m\bar{N}_{m'}. \quad (*)$$

Далее, при равновесии среднее число частиц в каждом из состояний N_m будем считать только функцией энергии этого состояния ε_m [$\bar{N}_m = \bar{N}(\varepsilon)$]. На основании закона сохранения энергии при столкновениях имеем:

$$\varepsilon_m + \varepsilon_{m'} = \varepsilon_n + \varepsilon_{n'}$$

Из (*) получаем:

$$\frac{\bar{N}_m}{1 \pm \bar{N}_m} \frac{\bar{N}_{m'}}{1 \pm \bar{N}_{m'}} = \frac{\bar{N}_n}{1 \pm \bar{N}_n} \frac{\bar{N}_{n'}}{1 \pm \bar{N}_{n'}} = C$$

C – некоторая постоянная, которая может зависеть лишь от суммы $\varepsilon_m + \varepsilon_{m'}$. Таким образом,

$$\frac{\bar{N}_m}{1 \pm \bar{N}_m} \frac{\bar{N}_{m'}}{1 \pm \bar{N}_{m'}} = C(\varepsilon_m + \varepsilon_{m'})$$

Обозначая $\bar{N}_m/1 \pm \bar{N}_m = \varphi(\varepsilon_m)$, мы перепишем в виде:

$$\varphi(\varepsilon_m)\varphi(\varepsilon_{m'}) = C(\varepsilon_m + \varepsilon_{m'})$$

Дифференцируя это равенство один раз по ε_m и другой по $\varepsilon_{m'}$ и деля один результат на другой, найдём:

$$\frac{\varphi'(\varepsilon_m)}{\varphi(\varepsilon_m)} = \frac{\varphi'(\varepsilon_{m'})}{\varphi(\varepsilon_{m'})} = -\frac{1}{\Theta} \quad (**)$$

где Θ - некоторая постоянная, не зависящая от ε . Интегрируя (**), по ε_m , находим:

$$\varphi(\varepsilon_m) = e^{-\varepsilon_m/\Theta + \alpha}$$

где α - постоянная интегрирования. Отсюда находим для среднего числа частиц в состоянии с энергией ε_m :

$$\bar{N}_m = \overline{N(\varepsilon_m)} = \frac{1}{e^{\varepsilon_m/\Theta - \alpha} \pm 1} \quad (\blacktriangleleft)$$

Знак "+" для частиц Ферми, знак "-" – для частиц Бозе. При большой энергии частицы ($\varepsilon \rightarrow \infty$) закон распределения по энергиям должен совпадать с классическим законом Больцмана:

$$\bar{N}(\varepsilon_m) = const * e^{-\varepsilon_m/kT},$$

где k – постоянная Больцмана, а T – абсолютная температура. Переходя в (\blacktriangleleft) к пределу $\varepsilon_m \rightarrow \infty$, находим, что $\Theta = kT$. Таким образом, окончательно имеем:

$$\bar{N}_m = \frac{1}{e^{\varepsilon_m/kT - \alpha} \pm 1}. \quad (\otimes)$$

Постоянная интегрирования α определится из условия равенства числа частиц во всех состояниях полному числу частиц в рассматриваемом объёме газа:

$$\sum_m \bar{N}_m = N.$$

Совокупность частиц, подчиняющихся закону распределения (\otimes) со знаком "+", носит название газа Ферми-Дирака, а со знаком "-" – газа Бозе-Эйнштейна.

Закон (\otimes) явно написан для дискретных состояний. Введём число состояний на интервал энергии $d\varepsilon$. Обозначим его через $V\rho(\varepsilon)d\varepsilon$, где V - объём всего газа. Тогда, суммируя (\otimes) по всем квантовым состояниям, энергия которых попадает в интервал $\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon$, мы получаем среднее число частиц газа, имеющих энергию между $\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon$ (закон распределения по энергиям):

$$F(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{V\rho(\varepsilon)d\varepsilon}{e^{\varepsilon/\Theta - \alpha} \pm 1},$$

и деля на V , получаем то же число для единицы объёма газа:

$$f(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{\rho(\varepsilon)d\varepsilon}{e^{\varepsilon/\Theta - \alpha} \pm 1} \quad (**)$$

Распределение (***) со знаком "+" носит название распределения Ферми-Дирака, а со знаком "-" – распределения Бозе-Эйнштейна.

Отличие расчётов, базирующихся на квантовой механике, от расчётов, базирующихся на классической механике, заключается в разном способе подсчёта числа возможных состояний. В квантовой механике состояние характеризуется заданием симметричной или антисимметричной волновой функции Ψ , и различные перестановки частиц по отдельным состояниям не дают нового состояния (Ψ переходит сама в себя или меняет знак). С точки зрения классической механики каждая такая перестановка означает новое состояние частиц. Классическая статистика, базирующаяся на таком подсчёте состояний, представляет собой предельный случай квантовой статистики, в котором число состояний исчисляется по числу различных волновых функций. В квантовой области различают две статистики – статистику Ферми-Дирака (для частиц, подчиняющихся принципу Паули, антисимметричные Ψ) и статистику Бозе-Эйнштейна (симметричные Ψ , частицы Бозе). В своих принципиальных основах эти две статистики не различаются.