Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1972

УДК 530.145

В. И. ЮКАЛОВ

ПРИНЦИП СИММЕТРИИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Рассматривается система тождественных частиц. Исследуются условия, при которых применение принципа симметрии для такой системы не обязательно. Показывается, что, например, кристалл можно с хорошим приближением описывать несимметризованной мультипликативной волновой функцией.

§ 1. Тождественность и симметрия

Будем рассматривать систему N одинаковых частиц с координатами $x \equiv \{x_1 \ldots x_N\}$. Состояние системы описывается функцией $\psi(x)$. Говорят, что частицы тождественны, если не меняются вероятностные свойства вектора состояния при перестановке координат любых двух частиц:

$$|\mathcal{P}\psi|^2 = |\psi|^2. \tag{1}$$

Выражение (1) суть математическая запись тождественности частиц.

Под принципом симметрии понимается следующее: функции состояния тождественных частиц обязательно либо симметричны, либо антисимметричны:

$$\mathcal{P}\psi = \pm\psi. \tag{2}$$

Распространено убеждение, что принцип симметрии (2) является следствием тождественности (1). Это утверждение встречается во многих учебниках по квантовой механике. Стандартное рассуждение при этом следующее: положим, $\mathcal{P}\psi = c\psi$ тогда из (1) вытекает, что $c = \pm 1$, откуда получается (2).

Ошибка в подобном доказательстве заключается в том, что неявно считается $c = \mathrm{const}$. А это ниоткуда не следует. Вообще, c может быть и функцией координат x, в которые включены и спиновые координаты. Тогда (1) дает лишь $|c| = 1$. Но переход к (2) отсюда неправомерен. На самом деле [1] принцип симметрии представляет собой дополнительный постулат и не является необходимым свойством частиц, вытекающим из квантовомеханического понятия тождественности. Неверность вывода о том, что (1) влечет за собой (2), может быть продемонстрирована на контрпримере [2]. Построим функцию

$$\psi'(x_1 \ldots x_N) = \psi_B(x_1 \ldots x_N) \prod_{i<j}{}' \operatorname{sgn}(x_i - x_j), \tag{3}$$

где $\psi_B(x_1 \dots x_N)$ — полностью симметричная функция $\mathrm{sgn}(x)$ — алгебраический $\mathrm{sgn}(\pm 1)$ от x, а штрих в произведении означает, что некоторые из $N(N-1)/2$ пар $i<j$ опущены. Нетрудно заметить, что (3) удовлетворяет (1), однако не удовлетворяет условию (2). Очевидно, для выполнения принципа симметрии кроме тождественности частиц на функцию ψ надо наложить еще какие-то требования. Чтобы иметь возможность строго сформулировать эти ограничения, введем некоторые определения.

Обозначим через C_e конфигурационное пространство всех x, на которых задана $\psi(x)$:

$$C_e = \{x : \psi(x)\}; \tag{4}$$

через C_0 конфигурационное пространство тех x, при которых $\psi(x)=0$:

$$C_0 = \{x : \psi(x) = 0\}; \tag{5}$$

через C — разность конфигурационных пространств (4) и (5), которую разложим в сумму подпространств, неприводимых относительно перестановочного $\mathscr{P}$-оператора:

$$C = C_e - C_0 = \bigcup_{\nu} C^{\nu}. \tag{6}$$

Если подпространство C^{ν} несвязно в геометрическом смысле, то его связные области в результате действия оператора перестановки $\mathscr{P}$ перемещаются целиком одно в другое, т. е. все они являются перестановочными образами друг друга и конгруэнтны. При этом само C^{ν} должно быть инвариантным относительно $\mathscr{P}$:

$$\mathscr{P}x \in C^{\nu}, \quad x \in C^{\nu}. \tag{7}$$

Определим также функцию

$$\psi^{\nu}(x) = \begin{cases} \psi(x); \; x \in C^{\nu} \\ 0; \; x \notin C^{\nu}. \end{cases} \tag{8}$$

Можно показать [3], что справедлива следующая теорема.

Теорема 1. Предположим, функция ψ, непрерывная в N-частичном конфигурационном пространстве C, принадлежит векторному пространству H, одновременно с $\mathscr{P}\psi$ и $\mathscr{L}\psi$, если $\mathscr{L}$ — произвольная динамическая переменная

$$\psi \in H; \; \mathscr{P}\psi \in H, \; \mathscr{L}\psi \in H, \tag{9}$$

существует по крайней мере одна физическая наблюдаемая, связывающая каждую пару неприводимых компонентов C:

$$\mathscr{L}^{\mu\nu}\psi^{\nu}(x) \neq 0, \quad x \in C^{\mu}, \quad \mu \neq \nu \tag{10}$$

(несмотря на то что $\psi^{\nu}(x)=0$ при $x \in C^{\mu}$). Тогда из тождественности частиц (1) вытекает принцип симметрии (2).

Таким образом, если неприводимые подпространства C не связаны между собой никаким подходящим физическим процессом в указанном выше смысле, то принцип симметрии строго выполняется лишь для частиц, ассоциируемых каждому отдельному подпространству, и не обязательно выполняется для частиц, находящихся в различных неприводимых подпространствах.

Например, имеются две потенциальные ямы, разделенные барьером конечной ширины, но бесконечной высоты. В каждой из ям находится одна частица. Последние совершенно между собой одинаковы. Внутрь указанного барьера частицы проникнуть не в состоянии, поэтому C_0 здесь — это совокупность координат обеих частиц, из которых по крайней мере одна принадлежит области барьера. Очевидно, поменяться местами частицы никоим образом не могут. Значит, конфигурационное пространство C, определяемое согласно (6), состоит из суммы двух несвязных подпространств $C=C^1+C^2$. Подпространство C^1 (аналогично C^2) есть просто та область, где может находиться одна частица, условно названная первой. Частицы, вообще говоря, могут и взаимодействовать между собой, но важно, чтобы не существовало динамической переменной, удовлетворяющей (10) для $\mu, \nu=1, 2$.

В этом случае из теоремы 1 следует, что волновые функции таких частиц симметризовать не нужно. Вот если бы в подпространствах C^1 и C^2 находилось по нескольку частиц одного сорта, тогда внутри C^1, как и внутри C^2, все функции должны быть симметризованы. Однако для любых двух частиц, заключенных в разных подпространствах (одна в C^1, другая в C^2) принцип симметрии не является необходимым. Этот результат совпадает с интуитивным убеждением, что волновую функцию для идентичных, но пространственно разделенных частиц симметризовать не надо. Но было неясно, что математически понимается под пространственной разделенностью. Теперь же ранее нестрогое высказывание приобрело корректную формулировку.

§ 2. Влияние малых возмущений

В предыдущем параграфе установлено, что когда для системы N тождественных частиц конфигурационное пространство C разлагается на подпространства, неприводимые относительно перестановок $\mathscr{P}$ и не связанные между собой в смысле (10), то состояние такой системы можно дефинировать с помощью функции ψ_{no}, которая не является симметризованной (симметричной или антисимметричной) по всем частицам. Она либо симметризована по некоторым группам частиц, принадлежащим одному и тому же неприводимому подпространству, либо не симметризована вовсе, если в каждом подпространстве заключена лишь одна частица. Значение ψ_{no} определяется, например, гамильтонианом $\mathscr{H}_0$ как частное решение уравнения:

$$\left(\mathscr{H}_0 - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi_{no} = 0\,. \tag{11}$$

Отсутствие связи (10) эквивалентно тому, что для любой динамической наблюдаемой $\mathscr{L}(x)$

$$\mathscr{L}\psi^{\nu}_{no}(x) = 0; \quad x \notin C^{\nu}. \tag{12}$$

Однако в реальных случаях условие (12) чаще всего или неверно, или выполняется приближенно. Но тогда по теореме 1 рассматриваемая система частиц должна описываться совершенно другой, симметризованной по всем аргументам, функцией ψ_s, задаваемой новым гамильтонианом $\mathscr{H}$:

$$\left(\mathscr{H} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi_s = 0. \tag{13}$$

Интересно исследовать задачу, когда условие (12) справедливо лишь в некотором приближении, а именно, когда $\mathscr{H}$ представляет собой слабо возмущенный гамильтониан $\mathscr{H}_0$

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_0+\lambda\mathscr{H}'; \quad 0<\lambda<1, \tag{14}$$

($\lambda\mathscr{H}'$ мало по сравнению с $\mathscr{H}_0$). Если пренебречь $\lambda\mathscr{H}'$, то придем к уравнению (11) с несимметризованной волновой функцией ψ_{no}. В качестве среднего для оператора $\mathscr{L}$ будем иметь $(\psi_{no}|\mathscr{L}|\psi_{no})$. Если же учитывать добавку $\lambda\mathscr{H}'$, сколь-бы мала она ни была, то получим принципиально другое уравнение (13) с полностью симметризованной функцией ψ_s. Среднее значение для $\mathscr{L}$ будет $(\psi_s|\mathscr{L}|\psi_s)$ Проверим, не приводит ли малое возмущение указанного типа к большому отличию $(\psi_s|\mathscr{L}|\psi_s)$ от $(\psi_{no}|\mathscr{L}|\psi_{no})$.

Теорема 2. Если ψ_{no} удовлетворяет условиям (9) и (12), то

$$\lim_{\lambda\to 0}(\psi_s|\mathscr{L}|\psi_s)=(\psi_{no}|\mathscr{L}|\psi_{no}). \tag{15}$$

Доказательство. Поскольку дополнительный член $\lambda\mathscr{H}'$ в гамильтониане (14) мал, естественно представить решение уравнения (13) по теории возмущений в виде

$$\psi_s=\psi_{so}+\lambda\psi_s'; \quad |\lambda\psi_s'|\ll|\psi_{so}|. \tag{16}$$

Здесь ψ_{s0} — полное решение уравнения (11), в то время как ψ_{no} (как указывалось выше) есть лишь его частное решение. Функция ψ_{s0} должна быть симметризованной, потому что гамильтониан $\mathscr{H}$ по условию (13) симметричен относительно перестановок входящих в него координат. Последнее справедливо, так как обычно полагается, что существует взаимно однозначное соответствие между гамильтонианом и решением, которое он определяет. Очевидно, при непрерывном переходе $\lambda\to 0$ симетричный оператор $\mathscr{H}$ перейдет в симметричный же $\mathscr{H}_0$. Полное решение уравнения (11) представляет собой линейную суперпозицию его частных решений, обладающих формой ψ_{no}:

$$\psi_{so}=\sum_{\nu}\varepsilon_\nu\psi_{no}^{\nu}; \quad \psi_{no}^{\nu}\equiv\mathscr{P}_\nu\psi_{no}, \tag{17}$$

где $\mathscr{P}_\nu$ — оператор перестановки, которая имеет порядок ν. Причем переставляются только несимметризованные координаты.

В (17), так же как и в (12), индекс ν в отличие от § 1 относится не к одному неприводимому конфигурационному подпространству, а к их совокупности, на которой определена ψ_{no}^{ν} что не меняет существа дела. Заметим, что в области определения ψ_{no}^{ν} могут быть и одночастичные неприводимые подпространства. Ясно, что для них инвариантность (7) выполняется относительно $\mathscr{P}\equiv 1$. Из принципа симметрии для (17) следует, что коэффициенты $\varepsilon\nu$ тождественно равны $(N!)^{-1/2}$ в случае статистики Бозе — Эйнштейна и равны $(N!)^{-1/2}(-1)^{\nu}$ случае статистики Ферми — Дирака. Вычисляем на основании (17) среднее значение от оператора $\mathscr{L}$:

$$(\psi_s|\mathscr{L}|\psi_s)=\sum_{\mu\nu}\overset{*}{\varepsilon}_\mu\varepsilon_\nu(\psi_{no}^{\mu}|\mathscr{L}|\psi_{no}^{\nu})+$$
$$+\lambda[(\psi_{so}|\mathscr{L}|\psi_s')+(\psi_s'|\mathscr{L}|\psi_{so})+\lambda(\psi_s'|\mathscr{L}|\psi_s')]. \tag{18}$$

Пока, несмотря на малость λ, ничего нельзя сказать, насколько $(\psi_s|\mathscr{L}|\psi_s)$ отличается от $(\psi_{no}|\mathscr{L}|\psi_{no})$. Но с помощью условия (12) первый член правой части (18) приводится к виду $\sum_\nu|\varepsilon_\nu|^2(\mathscr{P}_\nu\psi_{no}|\mathscr{L}|\mathscr{P}_\nu\psi_{no})$. Для ψ_s, ψ_{s0}, ψ_s' условие (12), вообще говоря, не соблюдается. По предположению ψ_{no} удовлетворяет условиям (9). Тогда $\mathcal{P}_\nu\psi_{no}$ принадлежит пространству H, тому же, что и ψ_{no}. Причем $\mathcal{P}_\nu\psi_{no}$ отличается от первоначальной ψ_{no} только расположением аргументов x. В таком случае

$$(\mathcal{P}_\nu\psi_{no} \mid \mathcal{P}_\nu\psi_{no}) = (\psi_{no} \mid \psi_{no}), \tag{19}$$

так как переобозначение переменных интегрирования на результат не влияет. Учитывая, что H — векторное пространство (стало быть линейное), что $\mathcal{L}$ — физическая наблюдаемая, (т. е. по определению эрмитов оператор) и что, кроме того, $\mathcal{L}\psi_{no} \in H$, с помощью простых алгебраических операций из (19) получим:

$$(\mathcal{P}_\nu\psi_1 \mid \mathcal{P}_\nu\psi_2) = (\psi_1 \mid \psi_2); \quad [\mathcal{L}, \mathcal{P}] = 0, \tag{20}$$

где ψ_1, ψ_2 — любые функции, принадлежащие H, а $[\mathcal{L}, \mathcal{P}]$ — коммутатор. Вспоминая, что $|\varepsilon_\nu|^2 = 1/N!$, используя (20), первое слагаемое в равенстве (18) преобразуем в $(\psi_{no} | \mathcal{L} | \psi_{no})$. Второе же слагаемое в правой части (18) стремится к нулю при $\lambda \to 0$. Утверждение (15) нами доказано.

Значит, в случае малых возмущений указанного типа для приближенного описания системы тождественных частиц можно пользоваться несимметризованными волновыми функциями.

§ 3. Несимметризованное приближение кристалла

Разберем конкретный пример системы тождественных частиц, образующих кристалл. Под кристаллом будем понимать систему, которой сопоставляется гамильтониан

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i<j}^{N} \Phi(|x_i - x_j|); \tag{21}$$

взаимодействие между частицами таково, что результирующая потенциальная энергия одной частицы имеет минимум в фиксированной точке пространства, называемой узлом:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\sum_{j=1}^{N}(1-\delta_{ij})\Phi(|x_i - x_j|)\right]_{x_i=a_i} = 0. \tag{22}$$

Каждая частица незначительно удаляется от своего узла, так что:

$$|x_i - a_i| \ll \min|a_i - a_{i+1}|; \quad i = 1\ldots N, \tag{23}$$

где a_{i+1} — узел, соседний с a_i-тым. Посмотрим, допустимо ли описывать подобную совокупность частиц несимметризованной волновой функцией.

Теорема 3. Для кристалла справедливо приближенное несимметризованное описание, использующее мультипликативную волновую функцию:

$$\psi_n = \prod_{i=1}^{N} \psi_i(x_i). \tag{24}$$

Доказательство. Пользуясь неравенством (23) попробуем представить гамильтониан (21) в виде, аналогичном (14). Для этого, ограничиваясь гармоническим приближением, разложим в ряд Тейлора потенциальную энергию взаимодействия одной частицы по x_i вблизи a_i, получим

$$\sum_{i<j}^{N}\Phi(|x_i-x_j|)\cong\frac{1}{2}\sum_{ij}^{N}(1-\delta_{ij})\Phi(|a_i-x_j|)+$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{ij}^{N}\sum_{\alpha\beta}^{3}(1-\delta_{ij})\frac{\partial^2\Phi(|a_i-x_j|)}{\partial a_i^\alpha\partial a_i^\beta}(x_i^\alpha-a_i^\alpha)(x_i^\beta-a_i^\beta). \tag{25}$$

Потом, поменяв местами немые индексы i и j в первом слагаемом (25), проделаем еще раз такое же разложение:

$$\sum_{j=1}^{N}(1-\delta_{ij})\Phi(|x_i-a_j|)\cong\sum_{j=1}^{N}(1-\delta_{ij})\Phi(|a_i-a_j|)+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{\alpha\beta}^{3}(1-\delta_{ij})\frac{\partial^2\Phi(|a_i-a_j|)}{\partial a_i^\alpha\partial a_i^\beta}(x_i^\alpha-a_i^\alpha)(x_i^\beta-a_i^\beta). \tag{26}$$

Через x_i^α обозначена проекция вектора x_i на одну из осей декартовых координат; α, $\beta=1, 2, 3$. Второе слагаемое в (25) разложим по x_j вблизи a_j. Введя обозначение

$$\mathscr{H}_i(x_i)=\frac{p_i^2}{2m}+$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(1-\delta_{ij})\left[\Phi(|a_i-a_j|)+\sum_{\alpha\beta}^{3}\frac{\partial^2\Phi(|a_i-a_j|)}{\partial a_i^\alpha\partial a_i^\beta}(x_i^\alpha-a_i^\alpha)(x_i^\beta-a_i^\beta)\right], \tag{27}$$

приходим к выводу, что в гармоническом приближении кристалл представляется как ансамбль N независимых гармонических осцилляторов

$$\mathscr{H}_0=\sum_{i=1}^{N}\mathscr{H}_i(x_i). \tag{28}$$

При этом конфигурационное пространство C распадается на сумму одночастичных подпространств C^i, которые согласно (23) не пересекаются между собой, значит являются несвязными. Оставшаяся часть гамильтониана $\mathscr{H}-\mathscr{H}_0$ играет роль $\lambda\mathscr{H}'$. При $\mathscr{H}_0$ из (28) уравнение (11) дает частное решение:

$$\psi_{no}=\prod_{i=1}^{N}\psi_{no}^{i}(x_i). \tag{29}$$

Каждая ψ_{no}^{i} задана лишь на C^i, но доопределяется относительно C^i на все C так же, как и ψ^ν относительно C^ν в (8). Непосредственным вычислением нетрудно убедиться, что все обычные динамические переменные $\mathscr{L}$ удовлетворяют при функции (29) соотношению (12). Однако последнее высказывание все-таки суть предположение, ограничивающее возможный вид операторов $\mathscr{L}$. Стало быть, его надо включить в условие теоремы. Будем полагать, что указанное предположение подразумевается, когда мы говорим о приближенном описании кристалла. В таком случае волновая функция (29) по теореме 2 приводит к приблизительно верному описанию кристалла в смысле истинности средних значений $(\psi_{no}|\mathscr{L}|\psi_{no})$. Чтобы повысить точность, можно для уравнения типа (11), но с гамильтонианом (21) искать решение в виде (24) и рассчитывать средние по формуле $(\psi_n|\mathscr{L}|\psi_n)$. Вышесказанное очевидно, так как при $\lambda\to 0$ мы получаем гармоническое приближение и $\psi_n\to\psi_{no}$, поэтому и

$$(\psi_n|\mathscr{L}|\psi_n)\to(\psi_{no}|\mathscr{L}|\psi_{no});\quad \lambda\to 0. \tag{30}$$

Итак, для приближенного исследования свойств кристалла удобно пользоваться несимметризованной мультипликативной волновой функцией. В классическом случае это адекватно использованию несимметризованых мультипликативных функций распределения, так как это было сделано в [4], результаты которой близки с вычисленными на основе симметризованных функций распределения [5].

Автор благодарен проф. Я. П. Терлецкому за предложенную тему настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Messiah A. M. L., Greenberg O. W. Phys. Rev., **136**, B248, 1964.
2. Girardeau M. D. Phys. Rev., **139**, No. 2B, 500, 1965.
3. Girardeau M. D. J. Math. Phys., **10**, No. 7, 1302, 1969.
4. Терлецкий Я. П., Зубов В. И. «Вестн. Моск. ун-та», физ., астрон., № 5, 53, 1968.
5. Базаров И. П. «Изв. вузов», физика, № 2, 97, 1967.

Поступила в редакцию
29.4 1971 г.

Кафедра
теоретической физики