

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

530.145.6(018)

**ПРИНЦИП ЗАПРЕТА И НЕРАЗЛИЧИМОСТЬ ТОЖДЕСТВЕННЫХ  
ЧАСТИЦ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ***И. Г. Каплан*

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение. Принцип запрета . . . . .	691
2. Принцип неразличимости тождественных частиц и постулат симметрии . . . . .	694
3. Формулировка принципа неразличимости через матрицу плотности и доказательство постулата симметрии . . . . .	697
Цитированная литература . . . . .	703

«Отыщи всему начало,  
И ты многое поймешь».

*Козьма Прутков*

## 1. ВВЕДЕНИЕ. ПРИНЦИП ЗАПРЕТА

Хотя принцип Паули был установлен им еще до создания квантовой механики, а более общий принцип запрета непосредственно после ее создания, тем не менее и сейчас, когда квантовая механика отметила свое 50-летие, нет единого мнения: является ли принцип запрета постулатом, вытекающим из экспериментальных данных, либо следствием других постулатов квантовой механики. В настоящей заметке мы обсудим существующие точки зрения и в заключение строго докажем, что принцип запрета следует из принципа неразличимости тождественных частиц и теоремы Паули о связи спина и статистики. Но вначале немного истории.

Вольфганг Паули пришел к формулировке своего принципа при объяснении закономерностей в классификации спектральных термов атомов в сильном магнитном поле. В работе <sup>1</sup>, направленной в печать в январе 1925 г., Паули следующим образом формулировал свой принцип:

«В атоме не может существовать двух или больше эквивалентных электронов, для которых значения всех четырех квантовых чисел одинаковы. Если в атоме находится электрон, для которого все эти числа имеют определенное значение, то это состояние «занято».

Четвертое квантовое число у Паули не описывалось никакой моделью. Он назвал связанное с ним свойство «характерной двужначностью квантовых свойств электрона, которую нельзя описать классически» <sup>2</sup>.

Эту неподдающуюся классическому описанию двужначность электрона ныне мы называем спином. Предвосхитив до создания квантовой механики квантовую природу магнитного момента электрона, Паули проявил поразительную интуицию. Интересно отметить, что эта же интуиция и присущая Паули строгость мышления не позволили ему сразу признать

гипотезу о спине, выдвинутую Кронигом и независимо Уленбеком и Гаудсмитом для объяснения происхождения у электрона четвертого квантового числа. Возражения Паули были связаны с тем, что в основе этой гипотезы лежало классическое представление о вращении электрона вокруг собственной оси. И хотя Уленбек и Гаудсмит<sup>3</sup>, предположив, что отношение собственного магнитного момента вращающегося электрона к механическому вдвое больше, чем в случае орбитального движения, объяснили дублетное расщепление в спектрах щелочных металлов, Паули был настроен очень скептически к их гипотезе. При встрече с Бором, склонявшимся под влиянием объяснения дублетного расщепления в сторону гипотезы о вращающемся электроне, Паули высказал сожаление, что в атомной физике возникает новая «ересь»<sup>4</sup>.

Мы теперь знаем, что, не соглашаясь с классической интерпретацией четвертой степени свободы электрона, Паули был прав. Спин принципиально не может быть описан классической моделью. В своей Нобелевской лекции Паули вспоминает<sup>5</sup>:

«...Принцип запрета оказался тесно связанным с представлением о спине. Хотя я сначала сильно сомневался в этой идее, ввиду ее классического характера, но в конце концов все же стал ее сторонником, после того как Томас<sup>6</sup> вычислил величину дублетного расщепления. С другой стороны, мои прежние сомнения, а также осторожное выражение «двузначность, не поддающаяся классическому описанию», в дальнейшем получили известное подтверждение, так как Бор показал с помощью волновой механики, что спин электрона нельзя измерить в классически описываемых опытах (например, посредством отклонения молекулярных пучков во внешних магнитных полях), и поэтому спин следует рассматривать как существенно квантовомеханическое свойство электрона».

Первыми работами, посвященными применению только что созданной квантовой механики к многочастичным системам, были работы Гейзенберга<sup>7</sup> и Дирака<sup>8</sup>. В этих работах сформулированный Паули принцип запрета двум электронам находиться в одном квантовом состоянии был получен как следствие антисимметричности волновой функции системы электронов. Дирак<sup>8</sup> при этом приходит к заключению, что световые кванты должны описываться симметричными волновыми функциями. Он специально отмечает, что система электронов не может описываться симметричными волновыми функциями, так как последние допускают нахождение в одном квантовом состоянии любого числа электронов.

Таким образом, с созданием квантовой механики запрет на числа заполнения состояний системы электронов заменился более общим запретом всех типов перестановочной симметрии волновых функций, кроме антисимметричного. Анализ экспериментальных данных позволил в дальнейшем сформулировать принцип запрета для всех известных частиц, а не только электронов. А именно: осуществляются только такие состояния системы тождественных частиц со спином  $s$ , полная волновая функция которых при перестановке любой пары частиц умножается на  $(-1)^{2s}$ , т. е. симметрична при целых значениях  $s$  (статистика Бозе — Эйнштейна) и антисимметрична при полуцелых  $s$  (статистика Ферми — Дирака).

Принцип запрета относится и к перестановочной симметрии составных частиц, например, ядер. В зависимости от значения спина ядер можно говорить о ядрах-бозонах и ядрах-фермионах. Более того, если произвольная система частиц может быть представлена как совокупность тождественных подсистем, симметрия волновой функции системы относительно перестановок подсистем определяется значением суммарного спина последних. Это позволяет классифицировать подсистемы на бозонные и фер-

мионные. Такой подход оказался очень удобен при нахождении разрешенных состояний сложных многоатомных систем<sup>9</sup>.

В приведенной выше формулировке принцип запрета ведет к целому ряду физически важных следствий. Одним из них является эффективное отталкивание между составными частицами, состоящими из одинаковых фермионов<sup>10-11</sup>. Отталкивание возникает на таких расстояниях между частицами, когда становится заметным перекрытие их волновых функций и полностью обусловлено требованием антисимметричности волновой функции системы относительно перестановок фермионов между частицами.

Другим хорошо известным примером могут служить молекулы с тождественными ядрами. Рассмотрим молекулу  $O_2^{16}$ . Ядра кислорода  $O^{16}$  состоят из четного числа фермионов и поэтому являются бозонами. К тому же спин ядра  $s = 0$ . Отсюда следует, что полная волновая функция молекулы  $O_2^{16}$ , совпадающая в данном случае с координатной волновой функцией (так как  $s = 0$ ), должна быть симметричной относительно перестановок ядер. В основном электронно-колебательном состоянии это приводит к запрету всех вращательных уровней с нечетными значениями вращательного момента.

Принцип запрета явился обобщением экспериментальных данных. Паули это обстоятельство никогда не удовлетворяло. В своей Нобелевской лекции<sup>5</sup>, прочитанной в 1946 г., он говорил:

«Уже в своей первоначальной работе я особенно подчеркивал то обстоятельство, что мне не удалось найти логического обоснования принципа запрета или вывести его из более общих предположений. У меня всегда было такое чувство, которое *не исчезло и до сих пор* (курсив мой. — И. К.), что в этом обстоятельстве повинен недостаток теории».

Существенный шаг вперед в обосновании принципа запрета был сделан Паули<sup>12</sup> в 1940 г. в его знаменитой теореме о связи спина со статистикой. В этой теореме Паули показал, что операторы поля частиц с целым спином не могут подчиняться фермионным соотношениям коммутации, так как это ведет к нарушению принципа причинности. Операторы поля частиц с полуцелым спином не могут подчиняться бозонным соотношениям коммутации, так как это ведет к отрицательным значениям полной энергии системы. Отсюда делалось заключение, что частицы с целым спином подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна, частицы с полуцелым — статистике Ферми — Дирака.

В этом доказательстве, так же как и в последующих<sup>13, 14</sup>, неявно постулируется, что возможны только два типа коммутационных соотношений для операторов поля: бозонные и фермионные. Между тем Грином<sup>15</sup> и независимо Волковым<sup>16</sup> было показано, что операторы поля, удовлетворяющие принципу причинности, релятивистской инвариантности и положительности энергии, могут подчиняться соотношениям коммутации более общим, чем бозонные и фермионные; это так называемые парабозонные и парафермионные соотношения коммутации. Соответствующая им парастатистика характеризуется  $p$ -кратным заполнением одночастичных состояний. При  $p = 1$  парастатистика переходит в статистику Ферми — Дирака, при  $p \rightarrow \infty$  — в статистику Бозе — Эйнштейна<sup>17</sup>. Если в случае бозонов и фермионов имеет место однозначное соответствие между описанием системы в конфигурационном пространстве симметричными и антисимметричными волновыми функциями и соотношениями коммутации для операторов поля, то в случае парастатистики это уже не так. Однозначной связи между видом перестановочных соотношений для операторов параполя и перестановочной симметрией волновой функции в конфигурационном пространстве установить нельзя<sup>18</sup>. Отсюда следует, что,

независимо от реализации парастатистики\*), вопрос о связи между значением спина и перестановочной симметрией волновой функции теорема Паули оставляет открытым.

Для того чтобы принцип запрета строго следовал из теоремы Паули, необходимо доказать, что система тождественных частиц может описываться только двумя типами волновых функций: симметричными и антисимметричными. Из уравнений Шрёдингера это не следует, так как ему удовлетворяют решения с произвольной перестановочной симметрией. Обсуждению возникающей в связи с этим ситуации и критическому анализу существующих точек зрения посвящен следующий раздел.

## 2. ПРИНЦИП НЕРАЗЛИЧИМОСТИ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ И ПОСТУЛАТ СИММЕТРИИ

Гамильтониан системы тождественных частиц по самому определению тождественности инвариантен относительно перестановок частиц. В результате уравнению Шрёдингера системы  $N$  тождественных частиц удовлетворяет любая линейная комбинация решений, различающихся перестановками координат частиц. Как известно из теории группы перестановок, такие линейные комбинации могут быть разбиты по типу симметрии на различные совокупности, не смешивающиеся друг с другом при перестановках, другими словами, образующие базисы неприводимых представлений группы перестановок. Здесь уместно напомнить читателю, что каждому неприводимому представлению группы перестановок может быть сопоставлено некоторое разбиение числа  $N$  на целые положительные слагаемые  $\lambda^{(i)}$  ( $\sum \lambda^{(i)} = N$ ), наглядно изображаемое в виде так называемой схемы Юнга<sup>23-24</sup>. Схемы Юнга принято обозначать символом  $[\lambda] \equiv [\lambda^{(1)} \dots \lambda^{(m)}]$ , где  $\lambda^{(i)}$  равно числу клеток в  $i$ -й строке; наличие строк с одинаковым числом клеток обозначается степенью при соответствующей  $\lambda^{(i)}$ . Схемы Юнга характеризуют тип симметрии базисных функций относительно перестановок аргументов. Схеме Юнга из одной строки  $[N]$  отвечает симметричная функция, схеме Юнга из одного столбца  $[1^N]$  — антисимметричная (неприводимые представления  $\Gamma^{[N]}$  и  $\Gamma^{[1^N]}$  одномерны). Все остальные схемы Юнга  $[\lambda]$  соответствуют промежуточным типам симметрии. Характеризуемые ими неприводимые представления  $\Gamma^{[\lambda]}$  всегда многомерны, т. е. описывают вырожденные по перестановкам состояния.

Согласно принципу запрета система тождественных частиц может находиться только в невырожденных по перестановкам состояниях: симметричном и антисимметричном. Все остальные типы симметрии запрещены. Правомочен вопрос: вытекает ли это ограничение на решение уравнения Шрёдингера из основных принципов квантовой механики, либо это независимый принцип.

Ряд исследователей<sup>25-28</sup>, в том числе один из основоположников квантовой механики Дирак, считают, что нет принципиальных запретов на существование в природе частиц, описываемых волновыми функциями

\*) Среди известных к настоящему времени элементарных частиц, частиц, подчиняющихся парастатистике, не обнаружено. Как показал Черников<sup>19</sup> (см. также<sup>20-21</sup>), парафермионным соотношения коммутации удовлетворяют обычные фермионы, различающиеся внутренними квантовыми числами. Так, дуклоны в ядре  $(n, p)$  могут быть описаны параферми-статистикой с максимальным числом заполнения  $p = 2$ , а триплет кварков  $(Q_n, Q_p, Q_\lambda)$  — параферми-статистикой с  $p = 3$ <sup>21, 22</sup>. Можно показать, что квазичастицы в периодической решетке (экситоны Френкеля, магны) подчиняются параферми-статистике.

с более сложными перестановочными свойствами, чем в случае фермионов и бозонов, а существующие ограничения обусловлены только свойствами известных нам частиц. Мессиа даже ввел термин — постулат симметрии, подчеркивая тем самым первичность ограничений на разрешенные типы перестановочной симметрии волновой функции. Применив лемму Шура, Мессиа и Гринберг<sup>28</sup> показали, что наличие перестановочного выражения не должно вносить дополнительной неопределенности в характеристику состояния. Последний результат непосредственно следует и из теоремы Вигнера — Эккарта, в форме, приданной ей Костером<sup>24, 29</sup>. Матричный элемент любого оператора  $\hat{L}$ , симметричного по всем частицам, согласно формуле (4.40) в работе<sup>24</sup> равен

$$\langle \Psi_r^{[\lambda]} | \hat{L} | \Psi_{\bar{r}}^{[\lambda]} \rangle = \delta_{r\bar{r}} \langle [\lambda] | \hat{L} | [\lambda] \rangle, \quad (1)$$

где индекс  $r$  нумерует базисные функции представления группы перестановок  $\Gamma^{[\lambda]}$ . Двойная черта в матричном элементе в правой части (1) обозначает независимость от индексов  $r, \bar{r}$ . Таким образом, среднее значение оператора  $\hat{L}$  одинаково для всех функций  $\Psi_r^{[\lambda]}$ , принадлежащих к вырожденному состоянию.

С другой стороны, в ряде учебников и монографий<sup>23, 30-32</sup> осуществление только невырожденных по перестановкам состояний выводится из принципа неразличимости частиц в квантовой механике. Однако, как справедливо отмечено в работе<sup>28</sup>, приводимые обычно доказательства содержат дополнительные нигде не следующие условия. Так, типичным является следующее доказательство.

Из требования, чтобы состояния системы, получаемые в результате перестановки тождественных частиц, были физически полностью эквивалентны, делается заключение, что в результате транспозиции двух частиц волновая функция должна измениться только на несущественный фазовый множитель

$$\Psi(x_2, x_1) = e^{i\alpha} \Psi(x_1, x_2), \quad (2)$$

где  $\alpha$  — действительная постоянная,  $x$  — совокупность пространственных и спиновой переменных. Последующее действие перестановки  $\hat{P}_{12}$  на (2) дает

$$\Psi(x_1, x_2) = e^{i2\alpha} \Psi(x_1, x_2), \quad (3)$$

или

$$e^{2i\alpha} = 1, \quad e^{i\alpha} = \pm 1. \quad (4)$$

Поскольку все частицы предполагаются тождественными, точно также должна себя вести волновая функция по отношению к перестановке любой пары, т. е. она должна быть либо полностью антисимметричной либо симметричной.

В приведенном доказательстве неразличимость тождественных частиц связывается непосредственно с поведением волновой функции. Между тем, поскольку волновая функция не является наблюдаемой, принцип неразличимости связан с ней только косвенно через выражения для измеряемых величин. Распространенное мнение, что волновые функции, описывающие одно и то же физическое состояние, могут различаться только на фазовый множитель, неверно. Так, согласно (1) значения физических величин, характеризующих систему тождественных частиц, для всех функций, принадлежащих к одному неприводимому представлению группы перестановок, одинаковы, следовательно, все эти функции описывают одно физическое состояние. Требование изменения функции при

перестановке только на фазовый множитель является фактически постулированием одномерности представления. Если для двух частиц осуществляются только одномерные представления ( $[\lambda] = [2], [1^2]$ ), то для  $N > 2$  все представления, кроме  $[\lambda] = [N], [1^N]$ , многомерны, и надо еще доказать, что волновая функция, переходящая при перестановках в линейную комбинацию функций, принадлежащих к данному вырожденному состоянию, несовместима с принципом неразличимости.

Подобное доказательство может быть строго проведено, но при этом надо исходить из корректной формулировки принципа неразличимости тождественных частиц. Одной из таких формулировок является следующая:

все наблюдаемые величины инвариантны относительно операции перестановки тождественных частиц, и обратно, перестановки тождественных частиц не могут быть наблюдаемы.

Поскольку физические величины выражаются в матричной формулировке квантовой механики в виде билинейных форм от волновых функций, принцип неразличимости требует инвариантности этих билинейных форм:

$$\hat{P} \langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle. \quad (5)$$

Вследствие унитарности операторов  $\hat{P}$  из равенства (5) следует равенство нулю коммутатора<sup>28</sup>

$$[\hat{P}\hat{L}] = 0. \quad (6)$$

Часто ограничиваются требованием инвариантности по отношению к перестановкам вероятности данной конфигурации системы тождественных частиц<sup>33-35</sup>

$$\hat{P} |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 \equiv |\hat{P} \Psi(x_1, \dots, x_N)|^2 = |\Psi(x_1, \dots, x_N)|^2. \quad (7)$$

Очевидно, (7) является частным случаем (5). Для того чтобы функция удовлетворяла (7), достаточно, чтобы она преобразовывалась при перестановках как

$$\hat{P}\Psi(x_1, \dots, x_N) = e^{i\alpha_P(x_1, \dots, x_N)} \Psi(x_1, \dots, x_N), \quad (8)$$

т. е., в отличие от требования (2), фаза в общем случае является функцией координат и перестановки. Очевидно, что равенства (3)–(4) в этом случае не выполняются.

Жирандо<sup>34</sup> с помощью привлечения топологических свойств конфигурационного пространства доказал, что функции, удовлетворяющие принципу неразличимости в форме (7), преобразуются по одному из одномерных представлений группы перестановок во всех точках конфигурационного пространства. Предварительные доказательства при ряде ограничений были даны в работах<sup>33,35</sup>. (Критику доказательств постулата симметрии, содержащихся в более ранних работах, см. в работах<sup>28, 33</sup>.)

Другой подход к доказательству постулата симметрии предложен Зальцманом<sup>36</sup>. В его основе лежит утверждение, что поскольку результат действия перестановки ненаблюдаем, оператор перестановки не может быть использован для различения волновых функций, принадлежащих данному энергетическому уровню, и поэтому среднее значение оператора перестановки для всех функций должно быть одинаковым. Последнее же выполняется только для одномерных представлений. Это доказательство нельзя признать убедительным. Возможность идентификации волновых функций по собственным значениям оператора перестановки не обязательно должна вести к реальному различению состояний.

В случае наличия вырождения по перестановкам среднее значение физических операторов согласно (1) одинаково для всех базисных функций, хотя диагональные матричные элементы операторов перестановок разные.

Традиционной формулировкой принципа неразличимости является требование инвариантности наблюдаемых величин относительно перестановок тождественных частиц (соотношения (5) — (8)). Можно, однако, подойти к этому с точки зрения неразличимости свойств различных частиц. Эти свойства естественно описывать с помощью одночастичной матрицы плотности. Ниже с помощью матрицы плотности, определенной для состояний с произвольной перестановочной симметрией, принцип неразличимости сформулирован непосредственно по отношению к свойствам самих тождественных частиц, без привлечения их перестановок. Это позволило провести прямое доказательство различимости частиц во всех перестановочных состояниях, кроме невырожденных, г. е. кроме симметричного и антисимметричного.

Таким образом, из наших результатов, так же как и из результатов Жирардо<sup>34</sup>, следует, что ограничения на перестановочную симметрию решений уравнения Шрёдингера вытекают из принципа неразличимости. Этот вывод в сочетании с выводом теоремы Паули, что частицы с целым спином не могут описываться антисимметричными волновыми функциями, а частицы с полуцелым — симметричными, полностью доказывают принцип запрета.

### 3. ФОРМУЛИРОВКА ПРИНЦИПА НЕРАЗЛИЧИМОСТИ ЧЕРЕЗ МАТРИЦУ ПЛОТНОСТИ И ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ПОСТУЛАТА СИММЕТРИИ

Введем одночастичную матрицу плотности для системы  $N$  частиц в состоянии с перестановочной симметрией, характеризуемой некоторой стандартной схемой Юнга  $[\lambda]$  из  $N$  клеток. В связи с тем, что волновые функции, описывающие такие состояния, принадлежат к  $f_\lambda$ -мерному неприводимому представлению  $\Gamma^{[\lambda]}$  группы перестановок  $\pi_N$ , матрица плотности помимо индекса представления  $[\lambda]$  характеризуется еще двумя индексами: индексом столбца представления  $r$ , по которому преобразуется данная волновая функция, и индексом  $t$ , различающим эквивалентные неприводимые представления

$$\rho_{rt}^{[\lambda]}(x'_i, x_i) = \int \Psi_{rt}^{[\lambda]}(x_1, \dots, x'_i, \dots, x_N)^* \Psi_{rt}^{[\lambda]}(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N) dV^{(i)}; \quad (9)$$

здесь  $dV^{(i)}$  обозначает элемент объема конфигурационного пространства системы без  $i$ -й частицы; для сокращения записи суммирование по дискретным спиновым переменным включено в знак интеграла.

Среднее значение одночастичного оператора  $\hat{f}(x_i)$ , характеризующего некоторое свойство  $i$ -й частицы системы \*) в состоянии с волновой функцией системы  $\Psi_{rt}^{[\lambda]}$ , определяется как

$$\bar{f}_i = \int [\hat{f}(x_i) \rho_{rt}^{[\lambda]}(x'_i, x_i)]_{x'_i = x_i} dx_i. \quad (10)$$

\*) Таким непосредственно наблюдаемым свойством может быть, например, вероятность выбивания из связанного состояния  $N$  частиц  $i$ -й частицы в результате внешнего воздействия на систему. Так, вероятность фотоионизации в нерелятивистской теории определяется величиной матричного элемента от оператора  $\hat{f}_i = (\mathbf{e}\hat{\mathbf{p}}_i) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}$ , где  $\mathbf{e}$ ,  $\mathbf{k}$  — вектор поляризации и волновой вектор фотона,  $\hat{\mathbf{p}}_i$ ,  $\hat{\mathbf{r}}_i$  — оператор импульса и радиус-вектор  $i$ -й частицы.

Для неразличимости частиц необходимо выполнение условия

$$\bar{f}_i = \bar{f}_j = \bar{f} \quad \text{для всех } i, j, \quad (11)$$

т. е. величина (10) не должна зависеть от номера частицы. Зависимость (10) от номера частицы означает, что в рассматриваемом состоянии частицы не эквивалентны и, следовательно, различимы. Соотношения (10) — (11) будем рассматривать как математическую формулировку принципа неразличимости.

Ограничимся рассмотрением нерелятивистских систем, находящихся в стационарных состояниях. Нетрудно показать, что в этом случае достаточно провести исследование для системы невзаимодействующих частиц. Волновой вектор  $|\Psi\rangle$  системы взаимодействующих нерелятивистских частиц, характеризуемой гамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}, \quad (12)$$

определен в том же гильбертовом пространстве, что и волновой вектор  $|\Psi_0\rangle$  системы без взаимодействия, и может быть получен из последнего с помощью некоторого унитарного преобразования

$$|\Psi\rangle = \hat{U} |\Psi_0\rangle. \quad (13)$$

Для нахождения вида этого унитарного преобразования можно воспользоваться известным соотношением, лежащим в основе ряда теории возмущений Бриллюэна — Вигнера<sup>37</sup>,

$$|\Psi\rangle = |\Psi_0\rangle + \frac{\hat{Q}}{E - \hat{\mathcal{H}}_0} \hat{V} |\Psi\rangle, \quad (14)$$

где  $\hat{Q}$  — проекционный оператор, проектирующий произвольный вектор на множество векторов гильбертова пространства, ортогональное к вектору  $|\Psi_0\rangle$ . Подставляя в (14) соотношение (13), получаем уравнение для  $\hat{U}$ , из которого находим

$$U^{-1} = 1 - \frac{\hat{Q}}{E - \hat{\mathcal{H}}_0} \hat{V}. \quad (15)$$

Поскольку оператор взаимодействия тождественных частиц  $\hat{V}$ , так же как и  $\hat{\mathcal{H}}_0$ , инвариантен относительно перестановок тождественных частиц, инвариантным является и оператор  $\hat{U}$ . Следовательно, согласно (13) перестановочная симметрия состояний  $|\Psi\rangle$  и  $|\Psi_0\rangle$  совпадает.

Рассмотрим систему  $N$  невзаимодействующих тождественных частиц. Каждая частица характеризуется ортонормированным набором одночастичных функций  $\{\psi_a\}$ . Состояние всей системы характеризуется заданием определенной конфигурации одночастичных состояний

$$K: \psi_a^{n_a} \psi_b^{n_b} \dots \psi_q^{n_q}, \quad \sum_c n_c = N, \quad (16)$$

$$n_a \geq n_b \geq \dots \geq n_q \quad (17)$$

и перестановочной симметрией некоторой схемы Юнга  $[\lambda]$  из  $N$  клеток. На величины чисел заполнения  $n_c$  в (16) никаких ограничений не накладываем. Упорядочение (17) удобно для характеристики состояния стандартной схемой Юнга, длины строк которой удовлетворяют условию

$$\lambda^{(1)} \geq n_a, \quad \lambda^{(2)} \geq n_b, \dots$$



Волновые функции системы, принадлежащие к базису неприводимого представления  $\Gamma^{[\lambda]}$  группы перестановок, строим из произведений одночастичных функций

$$\Psi_0(K) = \psi_a(x_1) \dots \psi_a(x_{n_a}) \psi_b(x_{n_a+1}) \dots \psi_q(N) \quad (18)$$

с помощью операторов Юнга  $\omega_{rt}^{[\lambda]}$  (см. формулу (2.30) в <sup>24</sup>):

$$\Psi_{rt}^{[\lambda]}(K) = \omega_{rt}^{[\lambda]} \Psi_0(K) = N^{[\lambda]}(K) \sum_{\hat{P}} \Gamma_{rt}^{[\lambda]}(\hat{P}) \hat{P} \Psi_0(K). \quad (19)$$

Индекс  $r$  нумерует  $f_\lambda$  базисных функций представления  $\Gamma^{[\lambda]}$ , индекс  $t$  нумерует независимые базисы, которые могут быть построены из функций  $\hat{P} \Psi_0(K)$ . В связи с тем, что среди одночастичных функций в (18) есть совпадающие, нормирующий множитель

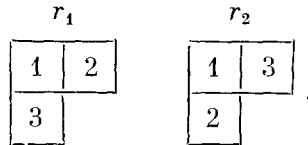
$$N^{[\lambda]}(K) = \sqrt{\frac{f_\lambda}{n_a! \dots n_q! N!}}. \quad (20)$$

Прежде чем исследовать выражение для среднего значения одночастичного оператора (10) в общем случае системы из  $N$  тождественных частиц, рассмотрим для наглядности систему из трех частиц. В этом случае легко выписать явный вид функций, принадлежащих к неприводимым представлениям группы перестановок трех объектов и вычислить среднее значение одночастичного оператора «в лоб».

Рассмотрим конфигурацию одночастичных состояний:  $\psi_a^2 \psi_b$ . Для такой конфигурации может быть построена одна полностью симметричная функция

$$\Psi^{[3]} = \frac{1}{\sqrt{3}} [\psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3) + \psi_a(1) \psi_a(3) \psi_b(2) + \psi_a(3) \psi_a(2) \psi_b(1)] \quad (21)$$

и две функции, преобразующиеся по двумерному неприводимому представлению  $\Gamma^{[21]}$ , характеризуемые таблицами Юнга



Вид функций легко находится с помощью операторов Юнга  $\omega_1^{[21]}$  и  $\omega_2^{[21]}$ , см. (2.39) в <sup>24</sup> (для конфигурации  $\psi_a^2 \psi_b$  может быть построен только один базис представления  $\Gamma^{[21]}$ , поэтому индекс  $t$ , нормирующий базисы, не нужен):

$$\Psi_1^{[21]} = \frac{1}{\sqrt{6}} \{2\psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3) - \psi_a(1) \psi_a(3) \psi_b(2) - \psi_a(3) \psi_a(2) \psi_b(1)\}, \quad (22)$$

$$\Psi_2^{[21]} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_a(1) \psi_a(3) \psi_b(2) - \psi_a(3) \psi_a(2) \psi_b(1)\}.$$

Непосредственное вычисление показывает, что если для функции  $\Psi^{[3]}$  мы имеем

$$\langle \Psi^{[3]} | \hat{f}_i | \Psi^{[3]} \rangle = \frac{1}{3} (2f_{aa} + f_{bb}) \quad \text{для } i = 1, 2, 3,$$

где  $f_{aa}$  обозначает  $\langle \psi_a(i) | \hat{f}_i | \psi_a(i) \rangle$ , то для функций (22)

$$\left. \begin{aligned} \langle \Psi_1^{[21]} | f_i | \Psi_1^{[21]} \rangle &= \frac{1}{6} (5f_{aa} + f_{bb}) \quad \text{для } i = 1, 2, \\ \langle \Psi_1^{[21]} | f_3 | \Psi_1^{[21]} \rangle &= \frac{1}{3} (f_{aa} + 2f_{bb}), \\ \langle \Psi_2^{[21]} | f_i | \Psi_2^{[21]} \rangle &= \frac{1}{2} (f_{aa} + f_{bb}) \quad \text{для } i = 1, 2, \\ \langle \Psi_2^{[21]} | f_3 | \Psi_2^{[21]} \rangle &= f_{aa}. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Матричные элементы для третьей частицы отличаются от соответствующих для первых двух частиц. Следовательно, для состояний, описываемых волновыми функциями, принадлежащими к двумерному представлению  $\Gamma^{[21]}$ , критерий неразличимости не выполняется. Совпадение матричных элементов для первых двух частиц связано с тем, что по отношению к ним функция  $\Psi_1^{[21]}$  симметрична, а  $\Psi_2^{[21]}$  антисимметрична.

Рассмотрим теперь произвольное состояние системы  $N$  частиц с конфигурацией (16), характеризуемое волновой функцией (19). Подставим выражение для  $\Psi_{rt}^{[\lambda]}(K)$  в определение матрицы плотности (9)

$$\rho_{rt}^{[\lambda]}(x_i, x_i) = N^{[\lambda]}(K)^2 \sum_{\hat{P}\hat{P}} \Gamma_{rt}^{[\lambda]}(\hat{P})^* \Gamma_{rt}^{[\lambda]}(\hat{P}) \times \\ \times \int \hat{P}\Psi_0(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N)^* \hat{P}\Psi_0(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N) dV^{(i)}. \quad (24)$$

Перестановки  $\hat{P}$  всегда могут быть представлены в виде произведения  $\hat{P}'\hat{P}_{ii_c}$ , где  $\hat{P}_{ii_c}$  переводит частицу  $i$  на место частицы, находящейся в состоянии  $\psi_c$ , а  $\hat{P}'$  на частицу  $i$  не действует, т. е.  $\hat{P}'$  принадлежит к группе перестановок  $\pi_{N-1}$ , получаемой из  $\pi_N$  отнятием  $i$ -й частицы. Это позволяет вынести  $\psi_c(x_i)$  из-под знака интеграла в (24). Если функция  $\psi_c$  содержится в конфигурации (16) несколько раз, то перевод  $i$ -й частицы на место аргументов рядом стоящих функций  $\psi_c$  осуществляется перестановкой  $\hat{P}_{ii_c \pm 1}$ , связанной с  $\hat{P}_{ii_c}$  соотношением

$$\hat{P}_{ii_c \pm 1} = \hat{P}_{i_c i_c \pm 1} \hat{P}_{i_c} \hat{P}_{i_c i_c \pm 1}.$$

Поскольку номера аргументов у повторяющихся одночастичных функций расположены в одной строке схемы Юнга, из свойств стандартного представления группы перестановок следует (ср. <sup>38</sup>), что

$$\Gamma_{rt}^{[\lambda]}(\hat{P}'\hat{P}_{ii_c \pm 1}) = \Gamma_{rt}^{[\lambda]}(\hat{P}'\hat{P}_{i_c}). \quad (25)$$

Перепишем (24), заменив суммирование по  $\hat{P}$  на суммирование по  $\hat{P}'$  и с и утя (25),

$$\rho_{rt}^{[\lambda]}(x_i, x_i) = N^{[\lambda]}(K)^2 \sum_{P'} \sum_{\bar{P}'} \sum_c \sum_{\bar{c}'} n_c n_{\bar{c}'} \Gamma_{rt}^{[\lambda]}(\hat{P}'\hat{P}_{ii_c})^* \times \\ \times \Gamma_{rt}^{[\lambda]}(\hat{P}'\hat{P}_{ii_c}) \psi_c(x_i)^* \psi_{\bar{c}'}(x_i) \int \hat{P}'\Psi_0(K_c)^* \hat{P}'\Psi_0(K_{\bar{c}'}) dV^{(i)}. \quad (26)$$

$K_c$  — обозначает конфигурацию  $K$  без орбитали  $c$ . Представим далее  $\hat{P}'$  в виде  $\hat{Q}^{(c)}\hat{P}_c$ , где  $\hat{Q}^{(c)}$  переставляет частицы только между разными одно-

частичными функциями конфигурации  $K_c$ , а  $\hat{P}_c$  — между одинаковыми. Учитывая ортогональность одночастичных функций и свойства стандартного представления группы перестановок, после несложных преобразований получаем \*)

$$\text{где коэффициенты } \rho_{rt}^{[\lambda]}(x'_i, x_i) = \sum_c M_{rt, ic}^{[\lambda]}(K) \psi_c(x'_i)^* \psi_c(x_i), \quad (27)$$

$$M_{rt, ic}^{[\lambda]}(K) = \frac{f_\lambda n_a! \dots n_g!}{\lambda!} \sum_{\hat{Q}^{(c)}} |\Gamma_{it}^{[\lambda]}(\hat{Q}^{(c)} \hat{P}_{ii_c})|^2. \quad (28)$$

Подставляя выражение для матрицы плотности (27) в определение (10), находим

$$\bar{f}_i = \sum_c M_{rt, ic}^{[\lambda]}(K) f_{cc}. \quad (29)$$

Коэффициенты  $M_{rt, ic}^{[\lambda]}$  зависят от номера частицы  $i$ , поэтому и среднее значение величины  $f$  будет в общем случае разное для разных частиц. Нетрудно убедиться, что расчет коэффициентов  $M_{rt, ic}^{[\lambda]}$  по формуле (28) для  $[\lambda] = [21]$  и  $K: \psi_a^2 \psi_b$  дает те же значения, что и полученные выше при непосредственном расчете матричного элемента; см. (23).

Таким образом, в случае произвольного неприводимого представления  $\Gamma^{[\lambda]}$  частицы различимы. Исключения составляют одномерные представления  $\Gamma^{[N]}$  и  $\Gamma^{[1^N]}$ . В этом случае для всех перестановок

$$|\Gamma_{it}^{[\lambda]}(\hat{Q}^{(c)} P_{ii_c})|^2 = 1$$

и

$$M_{rt, ic}^{[N], [1^N]} = \frac{n_c}{N}.$$

Для  $\bar{f}_i$  получаем

$$\bar{f}_i = \frac{1}{N} \sum_c n_c f_{cc} = \bar{f}, \quad (30)$$

т. е. частицы неразличимы.

Итак, несмотря на то, что средние значения операторов, описывающих свойства всей системы, согласно (1) совпадают для всех волновых функций, принадлежащих к вырожденному по перестановкам состоянию, анализ одночастичных свойств показывает, что в таких вырожденных состояниях частицы различимы.

Отсюда следует, что частицы различимы и в состояниях, описываемых несимметризованной волновой функцией. Такая функция всегда может быть представлена в виде суммы<sup>23, 24</sup>

$$\Psi = \sum_{\lambda, r} \psi_r^{[\lambda]}. \quad (31)$$

\*) В частном случае антисимметричного представления  $\Gamma^{[1^N]}$  все  $n_c = 1$ , в противном случае функция (19) обращается в нуль. Выражение (27), как и следовало ожидать, переходит в известное выражение для матрицы плотности Дирака<sup>37</sup>

$$\rho^{[1^N]}(x'_i, x_i) = \frac{1}{N} \sum_c \psi_c(x'_i)^* \psi_c(x_i), \quad (27')$$

определенной на детерминантных волновых функциях.

Поскольку для всех неприводимых представлений  $\Gamma^{[2]}$ , кроме  $\Gamma^{[M]}$  и  $\Gamma^{[N]}$ , частицы различимы, то в состоянии с функцией (31) частицы должны быть различимы. Для двух частиц осуществляются только одномерные представления. Однако очевидно, что суперпозиция функций  $\Psi^{[2]} + \Psi^{[1^2]}$  не удовлетворяет принципу неразличимости в форме (7).

Подчеркнем, что условие принадлежности волновой функции к одномерному представлению группы перестановок является необходимым, но не достаточным условием неразличимости частиц. Описание системы частиц, различающихся своими свойствами (зарядом, магнитным моментом и др.), симметричными либо антисимметричными функциями не приводит к их неразличимости\*). Хорошо известным примером являются нуклоны в ядре. Гамильтониан, включающий только сильные взаимодействия, симметричен по отношению к протонам и нейтронам (изотопическая инвариантность<sup>23</sup>). Формально протоны и нейтроны можно рассматривать как два состояния одной частицы — нуклона, различающиеся значением проекции изотопического спина. Волновая функция ядра должна быть антисимметричной относительно перестановок координат всех нуклонов, если помимо пространственной и спиновой координат переставлять также и изотопическую координату. Однако если учесть электромагнитные взаимодействия, то протоны становятся отличимы от нейтронов, хотя и в этом случае может быть построен симметричный гамильтониан<sup>33</sup>, допускающий в качестве решения антисимметричные функции.

Тождественные частицы можно считать различимыми при локализации их в пространственно удаленных ямах. Формально при использовании симметризованных волновых функций мы не можем сказать, в какой именно потенциальной яме находится данная частица. Однако при больших расстояниях между ямами обменные эффекты становятся пренебрежимо малыми и экспериментально никак не проявляются. Результат измерения не будет содержать интерференционных членов и в соответствии с подходом Фейнмана<sup>40</sup> частицы следует считать различимыми. Это может быть наглядно проиллюстрировано на примере поведения сечения фотоионизации молекулы  $H_2$  при разведении ядер.

Выражение для дифференциального сечения фотоионизации молекулы  $H_2$  при аппроксимации основного состояния молекулы функцией Гайтлера — Лондона, а волновой функции выбитого электрона плоской волной получено в работе<sup>41</sup>. Оно может быть представлено через атомное сечение фотоионизации

$$\frac{d\sigma_{H_2}}{d\Omega} = \frac{Z^* s (1 + s_{ab})}{1 + s_{ab}^2} [1 + \cos(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{R})] \frac{d\sigma_H}{d\Omega}, \quad (32)$$

где  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{q}$  — волновые векторы протона и электрона,  $|\mathbf{R}|$  — равновесное расстояние между ядрами,  $s_{ab} = \langle \varphi_a^{1s} | \varphi_b^{1s} \rangle$  — интеграл перекрытия атомных волновых функций.  $Z^* = 1,19$  — эффективный слейтеровский заряд, значение  $Z^* \neq 1$  вследствие возмущения атомного электронного облака соседним атомом H. Сечение содержит интерференционный член  $1 + \cos(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{R})$ , происходящий вследствие равной вероятности вылета электрона из центров  $a$  и  $b$ .

При увеличении расстояния между атомами их взаимодействие падает и  $Z^* \rightarrow 1$ , а интеграл перекрытия  $s_{ab} \rightarrow 0$ . В конечном состоянии электрон может быть выбит либо из атома  $a$ , либо из атома  $b$ . Выражение для

\*) Случаи неразличимости нетождественных частиц рассмотрены Любошицем и Подгорецким<sup>39</sup>.

сечения фотоионизации, полученное с антисимметризованными функциями, имеет вид, аналогичный (32) с  $s_{ab} = 0$ :

$$\frac{d\sigma_{2H}^{g,u}}{d\Omega} = (1 \pm \cos(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{R})) \frac{d\sigma_H}{d\Omega}. \quad (33)$$

Верхний знак соответствует состоянию, симметричному относительно операции инверсии, а нижний — антисимметричному. Оба эти состояния отвечают для удаленных атомов одинаковой энергии, поэтому

$$\frac{d\sigma_{2H}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{2H}^g}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{2H}^u}{d\Omega} = 2 \frac{d\sigma_H}{d\Omega},$$

т. е. сечение интерференционных вкладов не содержит. Процесс фотоионизации происходит независимо на каждом из атомов. Принципиально мы можем идентифицировать атом, из которого вылетел электрон.

В заключение пользуюсь приятной возможностью поблагодарить Я. Б. Зельдовича за просмотр статьи в рукописи и ценные замечания и Я. А. Смородинского за полезные обсуждения вопросов, затронутых в настоящей работе.

Научно-исследовательский  
физико-химический институт  
им. Л. Я. Карпова

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. W. Pauli, Zs. Phys. **31**, 765 (1925).
2. W. Pauli, *ibid.*, S. 373.
3. G. E. Uhlenbeck, S. Goudsmit, Naturwissenschaften **13**, 953 (1925).
4. Б. Ван-дер-Варден, в кн. Теоретическая физика 20 века, М., ИЛ, 1962, стр. 231.
5. В. Паули, *ibid.*, стр. 357.
6. L. H. Thomas, Nature **117**, 514 (1926).
7. W. Heisenberg, Zs. Phys. **38**, 411; **39**, 499 (1926).
8. P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A112**, 661 (1926).
9. И. Г. Каплан, О. Б. Родимова, ЖЭТФ **66**, 1560 (1974); ФТТ **16**, 3068 (1974).
10. Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ **37**, 569 (1959); Письма ЖЭТФ **20**, 214 (1974).
11. А. И. Базь, *ibid.* **14**, 607 (1971).
12. W. Pauli, Phys. Rev. **58**, 716 (1940).
13. G. Lüders, V. Zuminо, *ibid.* **110**, 1450 (1958).
14. Д. В. Волков, Тр. Физ. отд-ния ХГУ **7**, 75 (1958).
15. H. S. Green, Phys. Rev. **90**, 270 (1953).
16. Д. В. Волков, ЖЭТФ **36**, 1560 (1959); **38**, 518 (1960).
17. А. Исихара, Статистическая физика, М., «Мир», 1973.
18. O. W. Greenberg, A. M. Messiah, Phys. Rev. **B138**, 1155 (1965).
19. N. A. Chernikov, Acta Physica Polonica **21**, 51 (1962).
20. А. Б. Говорков, ЖЭТФ **54**, 1785 (1968); Ann. Phys. (N.Y.) **53**, 349 (1969).
21. А. В. Говорков, Intern. J. Theor. Phys. **7**, 49 (1973).
22. A. J. Bracken, H. S. Green, J. Math. Phys. **14**, 1784 (1973).
23. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., «Наука», 1974.
24. И. Г. Каплан, Симметрия многоэлектронных систем, М., «Наука», 1969.
25. П. А. М. Дирак, Принципы квантовой механики, М., Физматгиз, 1960.
26. Л. Шифф, Квантовая механика, М., ИЛ, 1957.
27. A. M. Messiah, Quantum Mechanics, v. 2, Amsterdam, North-Holland, 1962.
28. A. M. Messiah, O. W. Greenberg, Phys. Rev. **B136**, 248 (1964).
29. G. F. Koster, *ibid.* **109**, 227 (1958).
30. E. M. Corson, Perturbation Methods in Quantum Mechanics of Electron Systems, Glasgow, 1951.

31. Д. И. Б л о х и н ц е в, Основы квантовой механики, М., «Высшая школа», 1963.
32. В. Г. Л е в и ч, Ю. А. В д о в н и н, В. А. М я м л и н, Курс теоретической физики, т. 2, М., «Наука», 1971.
33. M. D. G i r a r d e a u, Phys. Rev. **139**, B500 (1965).
34. M. D. G i r a r d e a u, J. Math. Phys. **10**, 1302 (1969).
35. M. F l i c k e r, H. C. L e f f, Phys. Rev. **163**, 1353 (1967).
36. W. R. S a l z m a n n, *ibid.* **A2**, 1664 (1970).
37. Н. М а р ч, У. Я н г, С. С а м п а т х а р, Проблема многих тел в квантовой механике, М., «Мир», 1969.
38. I. G. К а р л а н, О. В. R o d i м о в а, Intern. J. Quantum Chem. **7**, 1203 (1973).
39. В. Л. Л ю б о ш и ц, М. И. П о д г о р е ц к и й, ЖЭТФ **55**, 904 (1968).
40. Р. Ф е й н м а н, А. Х и б с, Квантовая механика и интегралы по траекториям, М., «Мир», 1968.
41. И. Г. К а п л а н, А. П. М а р к и н, ДАН СССР **184**, 66 (1969).