поняття спіну й у 1925 сформулював один з найважливіших принципів сучасної теоретичної фізики, відповідно до якого дві тотожні частинки з напівцілими спінами не можуть знаходитися в одному стані, тобто не можуть мати однакові значення всіх чотирьох квантових чисел (головного, орбітального, магнітного і спінового). Принцип Паулі дав пояснення закономірностям, яким підкоряється заповнення електронних оболонок атомів, і послужив вихідним пунктом для пояснення тонкої і надтонкої структур атомних спектрів. У 1927 Паулі опублікував статтю, яка пояснює природу парамагнетизму металів, у якій зробив висновок, що поведінка електронів у металах підкоряється законам, заснованим на принципі заборони, а не класичним статистичним законам. Разом із В.Гейзенбергом почав спробу формулювання квантової електродинаміки, ввівши загальну схему квантування полів і заклавши тим самим основи систематичної теорії квантування полів. У 1931 висловив гіпотезу про існування нейтрино (нейтральної частинки з нульовою масою спокою і спіном 1/2). Паулі – автор фундаментальних робіт з теорії елементарних частинок, а також мезонної теорії ядерних сил.

Паулі був визнаний гідним медалей Х.Лоренца (1930), Б.Франкліна (1952), М.Планка (1958). Лауреат Нобелівської премії 1945р. з фізики «за відкриття принципу заборони, який ще називають принципом Паулі».

Елементарні частинки мають однакові властивості, коли в них однакова маса, заряд, спін, енергія тощо. Тобто, якщо поміняти місцями дві однакові частинки, то нічого не зміниться. Ця властивість покладена в основу ***принципу нерозрізняємості або тотожності елементарних частинок.***

Проте можна показати, що в системі двох електронів має місце обмінне виродження. Дійсно рівняння Шредінгера для двох тотожних не взаємодіючих частинок має такий вигляд:

$$(\Delta_{r1} + \Delta_{r2})\,\psi_{12}(r_1, r_2) + (2m_0/\hbar^2)(E - U^0{}_1 - U^0{}_2)\;\psi_{12}(r_1, r_2) = 0,$$

а його розв'язки:

$$\mathbf{E = E_1 + E_2;} \quad \psi_{12}(r_1, r_2) = \psi_1(r_1)\,\psi_2(r_2); \qquad \psi_{21} = \psi_1(r_2)\,\psi_2(r_1) \qquad (12.19)$$

Із формул (12.19) бачимо, що існує два різних стани ψ_{12} і ψ_{21} з однаковою енергією E, тобто має місце ***обмінне виродження, котре суперечить принципу тотожності однакових частинок.***

Отже, треба знайти такі розв'язки рівняння Шредінгера, котрі не суперечать принципу тотожності однакових частинок. Для цього введемо оператор перестановки частинок $\hat{P}$ такий, що

$$\psi(r_2 r_1) = \hat{P}\psi(r_1 r_2) \qquad (12.20)$$

Подіємо тепер на хвильову функцію оператором $\hat{P}$ двічі. Тоді

$$\hat{P}\hat{P}\psi(r_1r_2) = \hat{P}\psi(r_2r_1) = \psi(r_1r_2) \tag{12.21}$$

отримаємо початкову хвильову функцію. Тому

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{P} &= (\hat{P})^2 = 1 \\ \hat{P} &= \pm 1 \end{aligned} \tag{12.22}$$

Для двох можливих значень оператора $\hat{P}$ існують два різновиди хвильових функцій, а саме:

- ***симетричні,*** коли $\hat{P} = 1$, тобто $\hat{P}\psi_c(r_1r_2) = \psi_c(r_2r_1)$ і хвильова функція не змінює знака при перестановці двох тотожних частинок,

- ***антисиметричні,*** коли $\hat{P}\psi_c(r_1r_2) = -\psi_c(r_2r_1)$ і хвильова функція змінює знак при перестановці місцями двох тотожних частинок.

Сконструюємо такі хвильові функції, користуючись принципом суперпозиції:

$$\begin{aligned} \psi_C &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{12} + \psi_{21}\right) \\ \Psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{12} - \psi_{21}\right) \end{aligned} \tag{12.23}$$

де кожна із складових хвильових функцій $\psi_{12} = \psi_1(r_1)\cdot\psi_2(r_2)$ і $\psi_{21} = \psi_1(r_2)\cdot\psi_2(r_1)$ обмінно вироджена. Лінійна комбінація симетричних та антисиметричних хвильових функцій

$$\mathbf{u = C_c\psi_C + C_A\psi_A} \tag{12.24}$$

є також розв'язком вихідного хвильового рівняння Шредінґера, де $C_{C,A}$ - сталі коефіцієнти. Знайдемо тепер густину ймовірності $|u^*u|$

$$\begin{aligned} u^*u = (C_C\psi_C + C_A\psi_A)^*(C_C\psi_C + C_A\psi_A) = C^*_C C_C\psi_C\psi^*_C + \\ + C^*_A C_C\psi^*_A\psi_C + C^*_C C_A\psi^*_C\psi_A + C_A{}^*C_A\psi^*_A\psi_A \end{aligned} \tag{12.25}$$

Застосуємо тепер до (12.25) принцип тотожності частинок. Згідно цього принципу *перестановка частинок місцями не повинна змінити* u^*u. Згадаємо також, що оператор $\left(\hat{P}\right)^2 = 1$. Тому члени $\psi^*_C\psi_C$ і $\psi^*_A\psi_A$ не змінюють знак, а члени, в які входить ψ_A або ψ^*_A, змінюють знак при перестановці місцями частинок 1 і 2, тобто змінюється знак другого і третього членів в формулі (12.25). Для того щоб густина ймовірності u^*u не змінювала знак при перестановці місцями двох частинок, необхідно

вимагати, щоб мали місце такі співвідношення: $C_C C^*_A = 0$ або $C^*_C C_A = 0$. Із цих співвідношень виникає альтернатива:

- чи $C_C = 0$
- чи $C_A = 0$. (12.26)

Умови (12.26) означають, що при $C_C = 0$ стан описується антисиметричними хвильовими функціями, а при $C_A = 0$ - симетричними. Який з цих станів реалізується в природі повинен дати відповідь дослід.

В 1924 році лауреат нобелівської премії швейцарський фізик *Вольфганг* ***Паулі*** узагальнив існуючий дослід і встановив, що для ***стани частинок з напівцілим спіном (s = 1/2, 3/2, ...) описуються антисиметричними хвильовими функціями Ψ_A, а частинок з цілим спіном (s = 0, 1, 2,...) - симетричними хвильовими функціями Ψ_C.*** Це твердження називається ***принципом Паулі або принципом виключення***. Його можна сформулювати і інакше, а саме: ***в системі частинок з напівцілим спіном - ферміонів не може бути двох частинок, що знаходяться в одному і тому ж стані***. Дійсно ферміони описуються антисиметричними функціями:

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_1(1)\Psi_2(2) - \Psi_1(2)\Psi_2(1)\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\Psi_1(1) & \Psi_1(2)\\ \Psi_2(1) & \Psi_2(2)\end{vmatrix} \qquad (12.27)$$

де індекси при хвильових функціях означають трійку квантових чисел n, ℓ, m_l для частинок з однаковим спіном. Якщо $\psi_1(1) \equiv \psi_2(1)$, то і $\psi_1(2) \equiv \psi_2(2)$ тобто $\psi_A \equiv 0$ і такого стану не існує. Аналогічно, коли $\psi_2(1) \equiv \psi_2(2)$, то $\psi_A \equiv 0$ і такого стану також не існує. Цей розгляд можна узагальнити для системи будь-якої скінченої N кількості частинок. В цьому разі

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_1(1) & \psi_1(2) & \cdots & \psi_1(N)\\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \cdots & \psi_2(N)\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \cdots & \psi_N(N)\end{vmatrix}. \qquad (12.28)$$

Якщо дві частинки тотожні, то це означає, що $\psi_1 \equiv \psi_2$. Отже, детермінант з однаковими рядками дорівнює нулеві, тобто $\psi_A \equiv 0$ й такого стану не існує.

В атомі стан електронів визначається 4-ма квантовими числами n, ℓ, m_ℓ і m_s або n, ℓ, j і m_j. *В кожному із таких станів згідно принципу Паулі може знаходитись лише один електрон.*

Стани бозонів - ***частинок з цілим спіном описуються симетричними функціями.*** Тому для них не існує додаткових умов. Отже, в одному стані може знаходитись довільна кількість бозонів.

Різні властивості ферміонів і бозонів виявляються і в поведінці їх ансамблів, а саме:

- ***ферміони*** описуються за допомогою *статистики Фермі-Дірака*, в якій функція розподілу має такий вигляд

$$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_i}{kT}} + 1} \qquad (12.29)$$

- ***бозони*** описуються за допомогою *статистики Бозе-Ейнштейна*, в

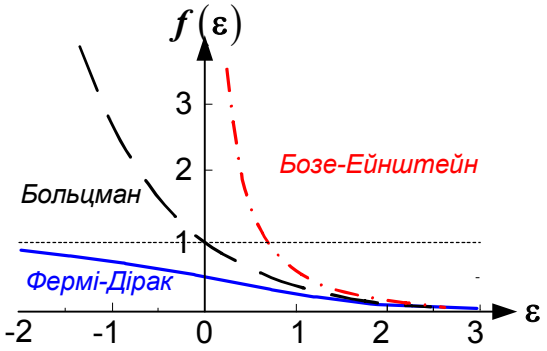


Рис.12.2. Функції енергетичного розподілу, $\varepsilon = (E - E_F)/k_B T$.

якій функція розподілу має такий вигляд

$$f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_i}{kT}} - 1} \qquad (12.30)$$

де E - енергія частинок, E_i - хімічний потенціал стану частинок, котрий визначає зміну термодинамічних потенціалів при зміні числа частинок. Для того щоб відновити у пам'яті вигляд цих функцій розподілу, вони разом з розподілом Больцмана наведені на рис. 12.2, із якого видно, що

вини дуже сильно відрізняються між собою особливо при малих значеннях $\varepsilon = \left(E - E_F\right)/k_B T$.

Зробимо ще одне зауваження. Принцип Паулі потрібно застосовувати до всіх частинок, що знаходяться у Всесвіті. Ця обставина може призводити до надзвичайно великих складнощів у визначені хвильових функцій, тому що потрібно було б враховувати існування безлічі частинок. Проте на практиці необхідно враховувати лише ті частинки, хвильові функції котрих перекриваються. Це значно спрощує задачу знаходження хвильових функцій, тому що ψ-функції досить швидко затухають із зростанням відстані між частинками r. В більшості практичних задач досить обмежитись врахуванням взаємодії частинок, що знаходяться на віддалях, що не більші за радіус першої борівської орбіти ($r < a_0$).

12.4. Вплив антисиметричності хвильових функцій на стаціонарні стани атому He

Ще раз розглянемо вплив взаємодії електронів на енергії стаціонарних станів атому гелію з урахуванням антисиметричності хвильових функцій його електронів. Для цього один із його електронів залишимо у стані 1s, а другий може займати стани з іншими квантовими числами. Хвильові функції, у виразі (12.23), представимо у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \psi_C^0(1,2) &= N_C\left\{\psi_1^0(1)\psi_\kappa^0(2) + \psi_\kappa^0(1)\psi_1^0(2)\right\} \\ \psi_A^0(1,2) &= N_A\left\{\psi_1^0(1)\psi_\kappa^0(2) - \psi_\kappa^0(1)\psi_1^0(2)\right\} \end{aligned}. \qquad (12.31)$$

Тут, як і раніше, індекси C і A означають симетричність і антисиметричність просторової частини хвильових функцій відносно перестановки1-го і 2-го електронів. Множники N_C і N_A характеризують спінові характеристики, використання яких робить функції $\psi_C^0(1,2)$ і $\psi_A^0(1,2)$ завжди антисиметричними. Після підстановки (12.31) у вираз (12.10) для внеску енергії взаємодії електронів до енергії стаціонарного стану отримаємо: