

**МОДЕЛЬ НЕКОММУТАТИВНЫХ ОПЕРАТОРОВ
КООРДИНАТ И ИМПУЛЬСОВ РАЗНЫХ ЧАСТИЦ**

Н. В. Кузьменко

Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Киев

Показано, что нерелятивистское уравнение Шредингера для системы взаимодействующих частиц, комптоновская длина волны которых одного порядка с размерами системы, является противоречивым и не является строго нерелятивистским уравнением, так как основано на неявном предположении о конечности скорости распространения взаимодействий. В рамках модели некоммутативных операторов координат и импульсов разных частиц получено уравнение для волновой функции, которое свободно от указанных недостатков. Выявлены существенные отличия от решений нерелятивистского уравнения Шредингера при больших значениях константы взаимодействия. Проведено сравнение аналогичных результатов с известными экспериментальными измерениями для водородоподобных атомов.

Как известно, граница, до которой возможно осмысленное введение понятия координаты нерелятивистской частицы в квантовой механике массой m , есть ее комптоновская длина волны \hbar/c [1]. Здесь $\hbar = h/2\pi$, где h - постоянная, введенная Планком, а c - скорость света в вакууме. Т.е. координату нерелятивистской частицы невозможно измерить точнее ее комптоновской длины волны $\Delta x > \hbar/mc$. Поэтому для системы двух нерелятивистских взаимодействующих частиц с массами m_1 и m_2 соответственно среднее расстояние между частицами не может быть измерено точнее чем

$$\Delta_{12} = \sqrt{\left(\frac{\hbar}{m_1 c}\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{m_2 c}\right)^2} = \frac{\hbar}{\mu c} \sqrt{1 - \frac{2\mu}{M}}, \quad (1)$$

где μ - есть приведенная масса системы $\mu^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}$, а $M = m_1 + m_2$ - полная масса системы двух частиц. Здесь предполагается, что $\hbar/m_1 c$ есть среднеквадратичное отклонение при измерении независимой координаты первой частицы, а $\hbar/m_2 c$ - второй. Тогда Δ_{12} в формуле (1) представляет собой среднеквадратичное отклонение при измерении расстояния между частицами [2]. Поэтому бессмысленно говорить о среднем расстоянии между частицами, которое меньше Δ_{12} .

С другой стороны, среднее расстояние между частицами в теории водородоподобного атома по Шредингеру для основного состояния равно $\langle |\hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_1| \rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar}{\mu c} \frac{1}{\alpha Z}$. Здесь Z - заряд атомного ядра, α - постоянная тонкой структуры. Видно, что при достаточно большом Z можно получить $\langle |\hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_1| \rangle \ll \hbar/\mu c$ (для водородоподобного атома $\mu/M \ll 1$).

Эти противоречия показывают, что уравнение Шредингера для системы нерелятивистских взаимодействующих частиц не является полностью корректным, так как среднее расстояние между частицами может быть значительно меньше Δ_{12} .

В теории Шредингера операторы координат и импульсов разных частиц коммутативны между собой, что означает отсутствие взаимных помех при измерениях координаты одной частицы и импульса другой. Последнее утверждение справедливо, если время измерения координаты частицы значительно меньше времени распространения светового сигнала на расстояниях размера системы или же комптоновская длина волны частиц значительно меньше размеров системы. Поэтому уравнение Шредингера очень хорошо работает в атомной

физике и физике твердого тела. Однако перенос уравнения Шредингера на атомное ядро кажется не совсем корректным, так как комптоновская длина волны нуклона сравнима с размерами самого атомного ядра. К тому же строгая нерелятивистская формулировка требует считать скорость распространения взаимодействий бесконечно большой, что заставляет нас считать операторы координат и импульсов разных частиц некоммутативными друг с другом [3]. Это приводит к существованию критического значения константы взаимодействия для кулоновского потенциала, больше которой основное состояние водородоподобного атома существовать не может. Работа [3] носит несколько феноменологический характер, поскольку выбор имеющегося в теории параметра неоднозначен. Настоящая статья развивает идеи, заложенные в предыдущей работе [3]. Имеющийся в теории параметр предлагается выбрать таким образом, чтобы наименьшее среднее расстояние между частицами для основного состояния в кулоновском поле было равно Δ_{12} . Для других потенциалов, особенно для короткодействующих типа Юкавы или Хюльтена, использование этого параметра приводит к средним расстояниям между частицами, которые не меньше Δ_{12} .

Как известно, классические уравнения движения частицы массой m во внешнем поле $V(\mathbf{r})$ получаются из функции Гамильтона $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r})$, которая зависит от координат \mathbf{r} частицы и от соответствующих импульсов \mathbf{p} . Полная энергия системы есть

$$E = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}). \quad (2)$$

Этой классической системе мы ставим в соответствие квантовую систему, динамическое состояние которой представляется волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$, определенной в конфигурационном пространстве. Волновое уравнение получается путем формальной замены в обеих частях соотношения (2) величин E , \mathbf{r} , \mathbf{p} соответствующими операторами [4]

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}, \quad (4)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (5)$$

Подразумевается, что результат действия обеих частей равенства (2), рассматриваемых как операторы, на $\Psi(\mathbf{r}, t)$ один и тот же. Запись этого обстоятельства дает нерелятивистское уравнение Шредингера для частицы во внешнем поле $V(\mathbf{r})$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (6)$$

Следует подчеркнуть, что операторы $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$ в (4) и (5) записаны в конфигурационном пространстве, а \mathbf{r} - есть вектор положения частицы в прямоугольной системе координат. Операторы координаты и импульса не коммутируют между собой

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar, \quad (7)$$

что приводит к соотношениям неопределенности Гейзенберга

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2, \quad (8)$$

где величины Δx , Δp_x , Δy , Δp_y , Δz , Δp_z непосредственно связаны с соответствующими измерениями и представляют собой среднеквадратичные отклонения от среднего значения.

Например, для координаты x это $\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$, где $\langle \hat{A} \rangle$ - среднее значение оператора \hat{A} на волновой функции $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Аналогично уравнению (6) поступают при написании нерелятивистского уравнения Шредингера для системы двух взаимодействующих частиц, функция Гамильтона которой

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|). \quad (9)$$

Здесь \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 - декартовы координаты положения двух частиц с массами m_1 и m_2 , \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 - их соответствующие импульсы, а потенциальная энергия зависит только от расстояния между частицами. Волновое уравнение получается путем формальной замены в обеих частях соотношения, аналогичного соотношению (2), величин E , \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 соответствующими операторами

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (10)$$

$$\mathbf{r}_1 \rightarrow \hat{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{r}_1, \quad (11)$$

$$\mathbf{r}_2 \rightarrow \hat{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{r}_2, \quad (12)$$

$$\mathbf{p}_1 \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_1 = -i\hbar \vec{\nabla}_1, \quad (13)$$

$$\mathbf{p}_2 \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_2 = -i\hbar \vec{\nabla}_2. \quad (14)$$

Операторы $\hat{\mathbf{r}}_1$, $\hat{\mathbf{r}}_2$, $\hat{\mathbf{p}}_1$, $\hat{\mathbf{p}}_2$ таковы, что удовлетворяют следующим коммутативным соотношениям: $[\hat{x}_k, \hat{p}_{kx}] = i\hbar$, $[\hat{y}_k, \hat{p}_{ky}] = i\hbar$, $[\hat{z}_k, \hat{p}_{kz}] = i\hbar$, $k = 1, 2$. Все остальные возможные коммутативные соотношения равны нулю, в том числе и такие:

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_{lx}] = 0, \quad [\hat{y}_k, \hat{p}_{ly}] = 0, \quad [\hat{z}_k, \hat{p}_{lz}] = 0, \quad k, l = 1, 2, \quad k \neq l. \quad (15)$$

Равенства (15) основаны на том предположении, что измерения координат и импульсов разных частиц принципиально не возмущают одно другое даже при наличии каких-либо сил взаимодействия между частицами. Т.е. предполагается, что изменение силового воздействия одной частицы на другую, вызванное измерением координаты первой, распространяется с конечной скоростью.

Итак, для получения нерелятивистского уравнения Шредингера системы двух частиц используется, с одной стороны, нерелятивистская классическая функция Гамильтона, а с другой - неявное предположение о конечности скорости распространения взаимодействий.

В полностью нерелятивистской квантовой теории мы должны считать скорость распространения взаимодействий бесконечно большой, что заставляет нас отказаться от выполнения коммутативных соотношений (15). Став на эту точку зрения, будем считать, что при измерении координаты первой частицы происходит неконтролируемая передача импульса не только этой частице, а всей системе в целом, так как частицы связаны между собой потенциалом взаимодействия, скорость распространения которого бесконечно большая. Поэтому естественно потребовать, чтобы коммутатор оператора координаты первой частицы с оператором полного импульса системы был равен $i\hbar$:

$$[\hat{x}_1, \hat{P}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}_1, \hat{P}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}_1, \hat{P}_z] = i\hbar. \quad (16)$$

Здесь $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$ - оператор полного импульса системы. Аналогично должно быть и для второй частицы.

Отметим, что соотношения (16) выполняются и для нерелятивистского уравнения Шредингера. Напротив, выполнение соотношений (15) не является обязательным для системы взаимодействующих частиц, и мы намерены от него отказаться.

В общем случае пусть $[\hat{x}_1, \hat{p}_{2x}] = i\hbar\hat{\epsilon}_{12}$, где $\hat{\epsilon}_{12}$ некоторый безразмерный эрмитов оператор. Тогда из соотношения (16) следует, что $[\hat{x}_1, \hat{p}_{1x}] = i\hbar(1 - \hat{\epsilon}_{12})$. Аналогично, если $[\hat{x}_2, \hat{p}_{1x}] = i\hbar\hat{\epsilon}_{21}$, то $[\hat{x}_2, \hat{p}_{2x}] = i\hbar(1 - \hat{\epsilon}_{21})$.

Безразмерные эрмитовы операторы $\hat{\epsilon}_{12}$ и $\hat{\epsilon}_{21}$ зависят в общем случае как от силы взаимодействия между частицами \mathbf{F}_{12} , так и от их масс m_1 и m_2 . Операторы $\hat{\epsilon}_{12}$ и $\hat{\epsilon}_{21}$ не могут зависеть от направления вектора \mathbf{F}_{12} , так как коммутативные соотношения для x , y и z составляющих должны быть одинаковыми, поскольку в системе нет выделенных направлений, а независимые переменные в прямоугольной системе координат полностью равноправны. Поэтому операторы $\hat{\epsilon}_{12}$ и $\hat{\epsilon}_{21}$ являются функциями абсолютной величины силы, т.е. $|\mathbf{F}_{12}|$.

Для операторов \hat{x}_1 и \hat{p}_{2x} , которые не коммутируют друг с другом, соотношение неопределенностей имеет вид

$$\Delta x_1 \Delta p_{2x} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{\epsilon}_{12} \rangle|, \tag{17}$$

где $\langle \hat{\epsilon}_{12} \rangle$ есть квантово-механическое среднее в состоянии $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$. В общем случае правая часть соотношения неопределенностей (17) принимает различные значения для каждого квантового состояния, что в такой постановке приводит к значительным трудностям при написании волнового уравнения. Существенно упростить задачу можно заменой оператора $\hat{\epsilon}_{12}$ модулем среднего квантово-механического значения $|\langle \hat{\epsilon}_{12} \rangle|$ для основного состояния системы. При этом правая часть соотношения (17) принимает наибольшее значение из всех возможных, так как в основном состоянии средняя сила взаимодействия между частицами является наибольшей и поэтому переданный импульс второй частице при измерении координаты первой максимален. Следует заметить, что в такой постановке соотношение неопределенностей (17) для основного состояния системы не изменится. Подобное упрощение можно сделать и для оператора $\hat{\epsilon}_{21}$, что в конечном итоге позволяет нам написать нерелятивистское волновое уравнение для системы двух частиц.

Коммутативные соотношения для операторов координат или импульсов разных частиц остаются теми же, что и в теории Шредингера $[\hat{x}_1, \hat{x}_2] = 0$, $[\hat{p}_{1x}, \hat{p}_{2x}] = 0$, что позволяет использовать \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 (или \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2) в качестве независимых переменных.

Выпишем теперь коммутативные соотношения для всех операторов координат и импульсов задачи двух тел:

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_{1x}] = i\hbar(1 - \epsilon_{12}), \tag{18}$$

$$[\hat{x}_2, \hat{p}_{2x}] = i\hbar(1 - \epsilon_{21}), \tag{19}$$

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_{2x}] = i\hbar\epsilon_{12}, \tag{20}$$

$$[\hat{x}_2, \hat{p}_{1x}] = i\hbar\epsilon_{21}, \tag{21}$$

$$[\hat{x}_1, \hat{x}_2] = 0, \quad (22)$$

$$[\hat{p}_{1x}, \hat{p}_{2x}] = 0. \quad (23)$$

Аналогичные соотношения имеют место для y и z составляющих.

Сделаем оценку величин ε_{12} и ε_{21} . Предположим, что переданный частице импульс порядка среднеквадратичного отклонения Δp . Тогда из формул (18) и (20) следует, что $\Delta x_1 \Delta p_{1x} \approx \hbar(1 - \varepsilon_{12})/2$ и $\Delta x_1 \Delta p_{2x} \approx \hbar \varepsilon_{12}/2$. Откуда

$$\varepsilon_{12} = \frac{\Delta p_{2x}}{\Delta p_{1x}} \left(1 + \frac{\Delta p_{2x}}{\Delta p_{1x}} \right)^{-1}. \quad (24)$$

Здесь Δp_{2x} - импульс, переданный второй частице при измерении координаты первой, а Δp_{1x} - импульс, переданный первой частице при измерении ее собственной координаты. Предположим далее, что мы измеряем координату первой частицы с самой высокой возможной точностью, т.е. $\Delta x_1 = \hbar / m_1 c$. При этом импульс, переданный второй частице, можно оценить как

$$\Delta p_{2x} = \langle |\mathbf{F}_{12}| \rangle \Delta t = \langle |\mathbf{F}_{12}| \rangle \frac{\Delta x_1}{c} = \langle |\mathbf{F}_{12}| \rangle \frac{\hbar}{m_1 c^2}. \quad (25)$$

Здесь $\langle |\mathbf{F}_{12}| \rangle$ - среднее значение силы в данном квантовом состоянии, Δt - время измерения координаты первой частицы. т.е. время, в течение которого может происходить взаимодействие между световым квантом и частицей и которое никак не может быть существенно меньше периода колебаний падающего и рассеянного излучения и составляет величину порядка $\Delta t = \hbar / mc^2$ для нерелятивистской частицы. Будем предполагать, что переданный второй частице импульс мал. Тогда импульс, который будет передан первой частице, можно

оценить как $\Delta p_{1x} = \frac{\hbar}{2\Delta x_1} = \frac{m_1 c}{2}$, а $\frac{\Delta p_{2x}}{\Delta p_{1x}}$ можно записать в виде $\frac{\Delta p_{2x}}{\Delta p_{1x}} = \xi \frac{m_2^2}{M^2}$. Здесь

$\xi = \frac{2\hbar}{\mu^2 c^3} \langle |\mathbf{F}_{12}| \rangle$. В дальнейшем будем предполагать, что функциональная зависимость от

средней силы взаимодействия $\langle |\mathbf{F}_{12}| \rangle$ для $\frac{\Delta p_{2x}}{\Delta p_{1x}}$ сохраняется, а более точную зависимость от

масс взаимодействующих частиц будем учитывать введением постоянной Ω , которая будет определяться условием равенства наименьшего среднего расстояния между частицами в основном состоянии водородоподобного атома величине Δ_{12} . Забегая вперед, отметим, что Ω зависит только от отношения μ / M . В итоге получаем выражение для величин ε_{12} и ε_{21}

$$\varepsilon_{12} = \Omega \xi \frac{m_2^2}{M^2} \left(1 + \Omega \xi \frac{m_2^2}{M^2} \right)^{-1}, \quad \varepsilon_{21} = \Omega \xi \frac{m_1^2}{M^2} \left(1 + \Omega \xi \frac{m_1^2}{M^2} \right)^{-1}. \quad (26)$$

Теперь можем построить одно из возможных представлений для операторов координат и импульсов системы двух частиц:

$$\hat{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{r}_1, \quad (27)$$

$$\hat{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{r}_2, \quad (28)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_1 = -i\hbar(1-\varepsilon_{12})\vec{\nabla}_1 - i\hbar\varepsilon_{21}\vec{\nabla}_2, \quad (29)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_2 = -i\hbar\varepsilon_{12}\vec{\nabla}_1 - i\hbar(1-\varepsilon_{21})\vec{\nabla}_2. \quad (30)$$

Заменяя операторы (27) - (30) в функции Гамильтона, получим волновое уравнение для системы двух частиц $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$, где гамильтониан системы

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}A_1\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2}A_2\Delta_2 - \hbar^2A_{12}(\vec{\nabla}_1 \cdot \vec{\nabla}_2) + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (31)$$

$$A_1 = \frac{(1-\varepsilon_{12})^2}{m_1} + \frac{\varepsilon_{12}^2}{m_2}, \quad A_2 = \frac{(1-\varepsilon_{21})^2}{m_2} + \frac{\varepsilon_{21}^2}{m_1}, \quad A_{12} = \frac{\varepsilon_{21}(1-\varepsilon_{12})}{m_1} + \frac{\varepsilon_{12}(1-\varepsilon_{21})}{m_2}.$$

Стандартной подстановкой $\Psi = \psi \exp(-iE_0 t/\hbar)$ получаем уравнение для стационарных состояний системы двух частиц $H\psi = E_0\psi$. Здесь E_0 - полная энергия системы двух частиц, а ψ зависит от координат в конфигурационном пространстве, но не зависит от времени. В этом случае уравнение для волновой функции допускает разделение переменных $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r})$ при следующей замене переменных:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (32)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_1}{M}\mathbf{r}_1 + \frac{m_2}{M}\mathbf{r}_2 + \frac{m_1\varepsilon_{12} - m_2\varepsilon_{21}}{M(1-\varepsilon_{12} - \varepsilon_{21})}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (33)$$

Гамильтониан системы при этом будет иметь вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2(1-\varepsilon_{12} - \varepsilon_{21})^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(|\mathbf{r}|). \quad (34)$$

При этом мы имеем квантово-механическое описание двух невзаимодействующих фиктивных частиц, первая из которых представляет собой свободное движение частицы с массой, равной сумме масс частиц, и импульсом, равным полному импульсу системы. Положение этой частицы задается вектором \mathbf{R} , который в общем случае теперь не является координатой центра масс системы, как в случае уравнения Шредингера, и только для одинаковых частиц \mathbf{R} представляет собой координаты центра масс системы. Вторая фиктивная частица с массой $m = \mu(1-\varepsilon_{12} - \varepsilon_{21})^{-2}$ движется в поле $V(|\mathbf{r}|)$ и представляет собой относительное движение двух частиц

$$\left[-\frac{\hbar^2(1-\varepsilon_{12} - \varepsilon_{21})^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(|\mathbf{r}|) \right] \phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}). \quad (35)$$

Здесь $(1-\varepsilon_{12} - \varepsilon_{21})^2 = \left(1 - \Omega^2\xi^2 \frac{\mu^2}{M^2}\right)^2 \left(1 + \Omega^2\xi^2 \frac{\mu^2}{M^2} + \Omega\xi\left(1 - \frac{2\mu}{M}\right)\right)^{-2}$, а $\xi = \frac{2\hbar}{\mu^2 c^3} \frac{\langle \Phi_0 | \mathbf{F}_{12} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle}$.

Так же как и в теории Шредингера, для частиц, взаимодействующих с помощью центрально-симметричного потенциала, волновая функция $\varphi(\mathbf{r})$ может быть представлена в виде $\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{lm} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right)$, где $Y_{lm} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right)$ - ортонормированные сферические функции. Тогда функция $\chi_l(r)$ будет удовлетворять уравнению

$$\left[-\frac{\hbar^2 (1 - \varepsilon_{12} - \varepsilon_{21})^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] \chi_l(r) = E \chi_l(r). \quad (36)$$

Параметр Ω можно определить, рассматривая основное состояние дискретного спектра водородоподобного атома. Пусть две частицы массами m_1 (атомное ядро) и m_2 (электрон) связаны кулоновским потенциалом $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$, где Z - заряд атомного ядра. Уравнение (36) представляет собой уравнение для радиальных функций водородоподобного атома по теории Шредингера и нормированные решения $\chi_{nl}(r)$ которого для связанных состояний хорошо известны, см., например, [4]. Собственные значения энергии связанных состояний равны

$$E_{nl} = -\frac{\mu c^2}{2} \cdot \frac{(\alpha Z)^2}{n^2} (1 + \Omega \xi_0)^2. \quad (37)$$

Здесь учтено, что $m_1 \gg m_2$ и у параметра ξ поставлен индекс 0, подчеркивая тот факт, что ξ определяется основным состоянием системы, а $l = 0, 1, \dots, n-1$, и $n = 1, 2, \dots, \infty$.

Подставив $\chi_{10}(r)$ в уравнение, определяющее ξ_0 , получим нелинейное уравнение относительно ξ_0

$$\frac{\eta_0}{(1 + \eta_0)^4} = 4\Omega(\alpha Z)^3; \quad \eta_0 = \Omega \xi_0. \quad (38)$$

Нелинейное уравнение (38) относительно η_0 имеет решения при условии $4\Omega(\alpha Z)^3 \leq 27/256$. Из двух решений пригодным является то, которое находится ближе к нулю. Второе решение должно быть отброшено, так как соответствует случаю, когда при уменьшении параметра αZ энергия связи возрастает. При $4\Omega(\alpha Z)^3 > 27/256$ уравнение (38) не имеет решений, что означает невозможность существования данного связанного состояния. Критическое значение константы взаимодействия $Z = Z_c$ достигается при $\eta_0 = 1/3$, При этом среднее расстояние между частицами достигает наименьшего значения

$$\langle |\hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_1| \rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar}{\mu c} \frac{1}{\alpha Z_c} \frac{1}{(1 + \eta_0)^2}. \quad (39)$$

Требование, чтобы это наименьшее значение равнялось $\hbar/\mu c$, позволяет определить параметр Ω , значение которого равно $32/729$. При этом критическое значение Z_c равно 115,6.

Энергия связи основного состояния водородоподобного атома, вычисленная с таким образом определенным параметром Ω , приведена на рис. 1. Видно, что уровни энергии основного состояния расположены ниже шредингеровских уровней и находятся выше уровней, вычисленных по теории Дирака, в довольно большом интервале константы взаимодействия ($0 < \alpha Z < 0,685$). Возбужденные состояния водородоподобного атома расположены ниже соответствующих шредингеровских уровней.

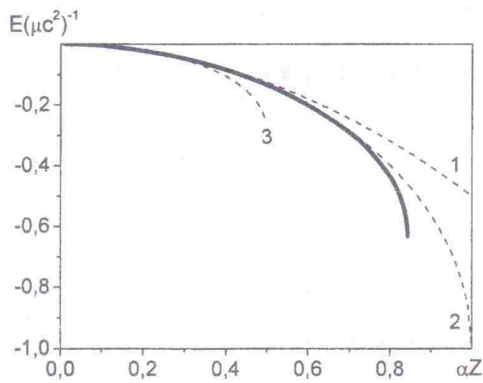


Рис. 1. Энергия связи основного состояния водородоподобного атома в зависимости от параметра αZ . Для сравнения приведена соответствующая зависимость согласно уравнениям Шредингера (1), Дирака (2) и Клейна - Гордона (3).

Параметры ϵ_{12} и ϵ_{21} для водородоподобного атома можно оценить как

$$\epsilon_{12} = \Omega \xi_0 \frac{m_2^2}{M^2} = \eta_0 \frac{m_2^2}{M^2}, \tag{40}$$

$$\epsilon_{21} = \frac{\Omega \xi_0}{1 + \Omega \xi_0} = \frac{\eta_0}{1 + \eta_0}. \tag{41}$$

Последняя зависимость приведена на рис. 2. Для атома водорода параметры ϵ_{12} и ϵ_{21} равны $\epsilon_{12} = 2,0 \cdot 10^{-14}$ и $\epsilon_{21} = 6,8 \cdot 10^{-8}$.

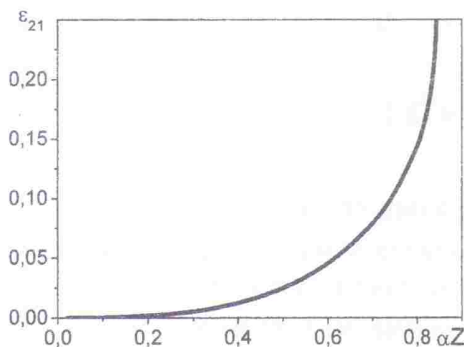


Рис. 2. Зависимость параметра ϵ_{21} от константы взаимодействия для водородоподобного атома.

Значительный интерес представляет сравнение полученных результатов с известными экспериментальными данными, а также их место по отношению к результатам нерелятивистской теории Шредингера, так как в последние годы выполнены очень точные экспериментальные измерения энергетических уровней атома водорода [5], легких водородоподобных атомов (см. обзор [6]), а также тяжелых ионов ^{92}U с одним электроном [7].

В таблице представлены энергии основных состояний некоторых водородоподобных атомов в сравнении с экспериментальными результатами и согласно уравнению Шредингера. Экспериментальные результаты для $Z = 6 - 42$ взяты из [8], а для $Z = 92$

из [7]. Последние две колонки, где представлены разности между теоретическими уровнями энергии по Шредингеру и согласно уравнению (37) с экспериментальными значениями, дают представление о преимуществе предложенного нерелятивистского квантово-механического метода описания водородоподобных атомов при больших константах взаимодействия (αZ), так как разность между теоретическим и экспериментальным значением энергии основного состояния водородоподобного атома для средних значений Z приблизительно в два раза меньше, чем по Шредингеру. Имеем очень хорошее согласие с экспериментальным значением энергии основного состояния для водородоподобного атома урана ^{92}U , что соответствует области пересечения ($Z = 94$) теоретической кривой зависимости энергии основного состояния от αZ и соответствующей кривой (см. рис. 1) для уравнения Дирака. В области критического значения константы взаимодействия ($Z = 115$) существенную роль играют релятивист-

ские эффекты и поэтому здесь следует ожидать худшего согласия с экспериментальными данными. К тому же учет релятивистских эффектов может изменить значение критической константы взаимодействия в сторону увеличения.

Энергия связи основного состояния E (см. уравнение (37)) некоторых водородоподобных атомов в сравнении с экспериментальными результатами E_{EXP} и согласно уравнению Шредингера E_S , эВ

Z	E	E_{EXP}	$E_S - E_{\text{EXP}}$	$E - E_{\text{EXP}}$
6	-489,8193	-489,9933	0,1884	0,1740
12	-1959,682	-1962,665	3,445	2,983
18	-4411,759	-4426,224	17,980	14,465
24	-7851,73	-7894,80	57,92	43,07
30	-12290,62	-12388,93	143,81	98,31
36	-17746,88	-17936,21	303,23	189,33
42	-24248,77	-24572,23	571,79	323,46
92	-131726	-131812	16653	86

Постоянная $\Omega = 32/729$ получена при условии $\mu/M \ll 1$. При другом соотношении между массами взаимодействующих частиц необходимо использовать полное выражение для ϵ_{12} и ϵ_{21} для нахождения постоянной Ω из условия, чтобы минимальное среднее расстояние между частицами достигало величины Δ_{12} . Хорошая аппроксимация зависимости Ω от μ/M достигается зависимостью $\Omega = \frac{32}{729} \left(1 - \frac{2\mu}{M}\right)$. Это удобно для квантовой системы из нескольких частиц с разными массами. Представляет значительный интерес ситуация с двумя одинаковыми частицами. При этом $\mu/M = 0,25$, $\Omega = 0,0211547$, а $(1 - \epsilon_{12} - \epsilon_{21})^2 = (1 - \Omega\xi_0/4)^2 (1 + \Omega\xi_0/4)^{-2}$.

При других потенциалах взаимодействия между частицами параметр Ω можно использовать тот, который получен для водородоподобного атома. Даже потенциалы с особенностью в нуле (типа Юкавы или Хьюльтена) приводят к среднему расстоянию между частицами, которое не меньше Δ_{12} из уравнения (1).

Предыдущие результаты легко обобщить на систему, состоящую из N частиц, которые связаны между собой двухчастичными силами. Пусть операторы координат и импульсов N частиц будут $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \dots, \hat{\mathbf{r}}_N, \hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \dots, \hat{\mathbf{p}}_N$. Оператор полного импульса системы $\hat{\mathbf{P}} = \sum_{k=1}^N \hat{\mathbf{p}}_k$. Аналогично задаче двух тел потребуем, чтобы коммутатор оператора координаты любой частицы с оператором полного импульса системы был равен $i\hbar$: $[\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{P}}] = i\hbar$, при $i = 1, 2, \dots, N$. Тогда, если $[\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_k] = i\hbar\epsilon_{ik}$ при $i \neq k$, то $[\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_i] = i\hbar - i\hbar \sum_{k=1}^N \epsilon_{ik}$ при $i = 1, 2, \dots, N$. Здесь параметр ϵ_{ik} равен нулю при $i = k$. Кроме того $[\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{r}}_k] = 0, [\hat{\mathbf{p}}_i, \hat{\mathbf{p}}_k] = 0$.

Одно из возможных представлений для операторов координат и импульсов частиц может быть записано как

$$\hat{\mathbf{r}}_i = \mathbf{r}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \tag{42}$$

$$\hat{\mathbf{p}}_i = -i\hbar \left[1 - \sum_{s=1}^N \varepsilon_{is} \right] \vec{\nabla}_i - i\hbar \sum_{k=1}^N \varepsilon_{ik} \vec{\nabla}_k, \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (43)$$

Здесь в качестве независимых переменных использованы координаты частиц, так как соответствующие операторы коммутативны между собой. Уравнение для задачи N частиц имеет вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \left[\frac{A_i}{m_i} \Delta_i + \sum_{k>i}^N 2B_{ik} (\vec{\nabla}_i \cdot \vec{\nabla}_k) \right] + \sum_{j>i}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right\} \Psi = E\Psi, \quad (44)$$

где $A_i = \left(1 - \sum_{s=1}^N \varepsilon_{is} \right)^2 + \sum_{s=1}^N \frac{m_i}{m_s} \varepsilon_{is}^2$, $B_{ik} = \frac{\varepsilon_{ki}}{m_i} \left(1 - \sum_{s=1}^N \varepsilon_{is} \right) + \frac{\varepsilon_{jk}}{m_k} \left(1 - \sum_{s=1}^N \varepsilon_{ks} \right) + \sum_{s=1}^N \frac{\varepsilon_{ks} \varepsilon_{is}}{m_s}$.

Особенно простой вид уравнение (44) принимает для важного случая одинаковых частиц при введении нормированных координат Якоби $\mathbf{q}_k = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left(k^{-1} \sum_{s=1}^k \mathbf{r}_s - \mathbf{r}_{k+1} \right)$ для $1 \leq k \leq (N-1)$ и $\mathbf{q}_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=1}^N \mathbf{r}_s$. В этом случае после отделения центра масс системы будем иметь

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 (1-N\varepsilon)^2}{2m} (\Delta_{\mathbf{q}_1} + \Delta_{\mathbf{q}_2} + \dots + \Delta_{\mathbf{q}_{N-1}}) + V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{N-1}) \right\} \Phi = E\Phi, \quad (45)$$

где $\varepsilon = \frac{2\hbar}{m^2 c^3} \langle \Phi_0 | \mathbf{F}_{12} | \Phi_0 \rangle \Omega(1/4) \left(1 + \frac{2\hbar}{m^2 c^3} \langle \Phi_0 | \mathbf{F}_{12} | \Phi_0 \rangle \Omega(1/4) \right)^{-1}$, $m = m_i$, $\varepsilon = \varepsilon_{ij}$, $i \neq j$.

Уравнение Шредингера для системы взаимодействующих частиц не является строго нерелятивистским уравнением, так как основано на неявном предположении о конечности скорости распространения взаимодействий. Последнее означает: если коммутатор операторов координаты и соответствующего импульса свободной частицы равен $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, то в системе связанных частиц этот коммутатор имеет тоже самое значение $i\hbar$. Однако в нерелятивистской квантовой системе при измерении координаты частицы весь переданный импульс распределяется по всем частицам, а не только передается измеряемой. Поэтому в системе взаимодействующих частиц этот коммутатор должен иметь вид $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar\delta$, где $0 < \delta < 1$. Следует заметить, что предположение $[\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{p}}_k] = i\hbar\varepsilon_{ik}$ при $i \neq k$ не приводит к аналогии с классической механикой. При $\varepsilon_{ik} \rightarrow 0$ квантовые скобки Пуассона переходят в классические скобки Пуассона, т.е. в этом случае мы имеем полную аналогию между классической и квантовой механикой. Как видно из рис. 2, ε_{ik} существенно отлично от нуля в системах, размеры которых порядка комптоновской длины волны составляющих ее частиц. В этом случае подобной аналогии с классической механикой нет.

Свойства решений предложенного уравнения существенно отличаются от шредингеровских решений для систем, у которых комптоновская длина волны частиц сравнима с размерами системы, т.е. учет некоммутативности операторов координат и импульсов разных частиц важен (наряду с релятивистскими поправками) для квантовой механики атомов с большим зарядом ядра ($\alpha Z \sim 1$), а также для явлений физики атомного ядра, где размеры системы порядка комптоновской длины волны составляющих ее частиц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Landau L., Peierls R. Extending of a Principle of Uncertainty on the Relativistic Quantum Theory // *Zs. Phys.* - 1931. - Vol. 69. - P. 56.
2. Taylor J.R. An Introduction to Error Analysis. - California: University Science Books Mill Valley, 1982.
3. Kuzmenko M.V. Nonrelativistic wave equation for a system of interacting particles // *Phys. Rev.* - 2000. - Vol. A61. - P. 014101.
4. Messiah A. Quantum Mechanics. Vol. 1, 2. - Amsterdam: North-Holland Publisher Company, 1962.
5. Udem Th., Huber A., Gross B. et al. Phase-Coherent Measurement of the Hydrogen 1S-2S Transition Frequency with an Optical Frequency Interval Divider Chain // *Phys. Rev. Lett.* - 1997. - Vol. 79. - P. 2646.
6. Eides M.I., Grotch H., Shelyuto V.A. Theory of Light Hydrogenlike Atoms // *Phys. Rept.* - 2001. - Vol. 342. - P. 63.
7. Stöhlker Th., Mokler P.H., Bosch F. et al. 1s Lamb Shift in Hydrogenlike Uranium Measured on Cooled, Decelerated Ion Beams // *Phys. Rev. Lett.* - 2000. - Vol. 85. - P. 3109.
8. NIST Atomic Spectra Databases (<http://physics.nist.gov>).

**МОДЕЛЬ НЕКОММУТАТИВНИХ ОПЕРАТОРІВ КООРДИНАТ
ТА ІМПУЛЬСІВ РІЗНИХ ЧАСТИНОК**

М. В. Кузьменко

Показано, що нерелятивістське рівняння Шрьодінгера для системи взаємодіючих частинок, комптонівська довжина хвилі яких одного порядку з розмірами системи, має деякі протиріччя й не є строгим нерелятивістським рівнянням, оскільки воно побудовано на неявному припущенні про скінченність швидкості розповсюдження взаємодії. У рамках моделі некоммутативних операторів координат та імпульсів різних частинок отримано рівняння для хвильової функції, яке не має вказаних недоліків. Знайдено суттєві відмінності від розв'язків нерелятивістського рівняння Шрьодінгера при великих значеннях константи взаємодії. Проведено порівняння аналогічних результатів із відомими експериментальними дослідженнями воднеподібних атомів.

**MODEL OF THE NON-COMMUTATIVE OPERATORS OF COORDINATES
AND MOMENTA OF DIFFERENT PARTICLES**

M. V. Kuzmenko

It is shown that the Schrödinger equation for a system of interacting particles whose Compton wavelengths are of the same order of magnitude as the system size has contradictions and is not strictly non-relativistic, because it is based on the implicit assumption that the velocity of propagation of interactions is finite. In the framework of the model of the non-commutative operators of coordinates and momenta of different particles, the equation for wave function which has no above-mentioned drawbacks is deduced. The significant differences from solutions of the non-relativistic Schrödinger equation for large values of the interaction constant are found and the comparison of analogous results for hydrogenlike atoms with experimental data is carried out.

Поступила в редакцію 11.03.05,
после доработки – 17.10.05.