

Kapitola 8

Vícečasticové systémy

Dosud jsme se zabývali jen jedinou částicí. Zkoumali jsme její chování v jedné dimenzi (viz harmonický oscilátor a 1D potenciálové jámy) a pak jsme svůj popis rozšířili i do dvou a tří dimenzí, což nám umožnilo prozkoumat nejjednodušší atom v přírodě – atom vodíku. Nyní pojdme v našem popisu světa udělat další krok a přidejme si do našeho systému další částice, abychom mohli zkoumat třeba také atom hélia a složitější systémy.

Abychom mohli tato rozšíření provést, musíme doplnit také náš matematický aparát a přizpůsobit postuláty, ze kterých jsme dosud vycházeli. Podrobme je tedy celkové revizi.

8.1 Rozšíření postulátů kvantové mechaniky na systém s více částicemi

8.1.1 Vlnová funkce vícečasticových systémů

Jak víme, vlnová funkce jedné částice má tvar

$$\psi = \psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t),$$

je to tedy funkce prostorových souřadnic a času. Ve vlnové funkci N částic musíme zohlednit souřadnice každé z nich, a proto

$$\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t),$$

bude se tedy jednat o funkci souřadnic všech částic a času.

Jak víme, vlnová funkce jako taková nemá přímočarý fyzikální význam, ten má až kvadrát její absolutní hodnoty, tedy hustota pravděpodobnosti nalezení částice v určité části prostoru. Zde dostáváme

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2, \quad (8.1)$$

což vyjadřuje „hustotu pravděpodobnosti, že první částici nalezneme v místě \vec{r}_1 , zároveň druhou částici nalezneme v místě \vec{r}_2 , ... a N -tou částici v místě \vec{r}_N .“

A podobně jako v případě jedné částice klademe normovací podmínku, která říká, že celková pravděpodobnost nalezení všech částic v celém prostoru, kde je zkoumám, musí být rovna 1, tedy

$$\int_{c.p.} |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d\vec{r}_1^3 d\vec{r}_2^3 \dots d\vec{r}_N^3 = 1. \quad (8.2)$$

Jinými slovy, když zavřu sedm elektronů do krabice, tak mám jistotu, že je tam najdu, a nikde jinde.

Kdyby nás zajímala hustota pravděpodobnosti nalezení jedné konkrétní částice v daném kousku prostoru a poloha ostatních částic v systému by nás nezajímala, použili bychom jednočásticovou hustotu pravděpodobnosti ve tvaru

$$\rho(\vec{r}_1) = \int_{c.p.} |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d\vec{r}_2^3 \dots d\vec{r}_N^3. \quad (8.3)$$

Zjednodušeně řečeno, $\rho(\vec{r}_1)$ vyjadřuje hustotu pravděpodobnosti, že první částice naměříme v okolí bodu o souřadnici \vec{r}_1 a ostatní částice „jsou, kde chtějí“ – a právě proto jsme přes souřadnice ostatních částic hustotu pravděpodobnosti $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ vyintegrovali.

Podobně bychom mohli zkoumat hustotu pravděpodobnosti, že první a druhou částici nalezneme v okolí bodů o souřadnicích \vec{r}_1 a \vec{r}_2 a ostatní částice naměříme kdekoliv, tedy bychom uvažovali dvoučásticovou hustotu pravděpodobnosti

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int_{c.p.} |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d\vec{r}_3^3 \dots d\vec{r}_N^3. \quad (8.4)$$

8.1.2 Operátory fyzikálních veličin

K nalezení operátorů polohy a hybnosti \hat{r}_k, \hat{p}_k pro každou částici využijeme princip korespondence, takže složky operátorů budou mít stejný tvar, jako v případě jednočásticových systémů.

$$\begin{array}{lll} \hat{r}_k = \vec{r}_k & \dots & \hat{x}_k = x_k \\ & & \hat{y}_k = y_k \\ & & \hat{z}_k = z_k \\ \hat{p}_k = -i\hbar\nabla & \dots & \hat{p}_{x_k} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \\ & & \hat{p}_{y_k} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y_k} \\ & & \hat{p}_{z_k} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z_k} . \end{array}$$

Indexem k označujeme, o kterou částici se jedná.

Operátor kinetické energie pro N částic pak dostaneme z výše zavedených operátorů polohy a hybnosti díky principu korespondence. V klasické mechanice má kinetická energie jednoho hmotného bodu tvar

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} .$$

Operátor kinetické energie pak dostaneme pouhým „ostříškováním“ klasické kinetické energie jako

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) .$$

Pro N částic se bude operátor kinetické energie skládat z příspěvků kinetických energií všech částic, podobně jako je tomu u kinetické energie soustavy hmotných bodů v klasické mechanice, tedy

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right) - \dots - \frac{\hbar^2}{2m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right) \\ &= -\sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_k} \Delta_k . \end{aligned}$$

Pokud bychom provedli podobné přeznačení jako při přechodu do konfiguračního prostoru v teoretické mechanice, kde

$$\begin{array}{ll}
 \hat{x}_1 \equiv \hat{x}_1 & \hat{p}_{x_1} \equiv \hat{p}_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \\
 \hat{y}_1 \equiv \hat{x}_2 & \hat{p}_{y_1} \equiv \hat{p}_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \\
 \hat{z}_1 \equiv \hat{x}_3 & \hat{p}_{z_1} \equiv \hat{p}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_3} \\
 \vdots & \vdots \\
 \hat{x}_N \equiv \hat{x}_{(3N-2)} & \hat{p}_{x_N} \equiv \hat{p}_{(3N-2)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{(3N-2)}} \\
 \hat{y}_N \equiv \hat{x}_{(3N-1)} & \hat{p}_{y_N} \equiv \hat{p}_{(3N-1)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{(3N-1)}} \\
 \hat{z}_N \equiv \hat{x}_{3N} & \hat{p}_{z_N} \equiv \hat{p}_{3N} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{3N}},
 \end{array}$$

mohli bychom celou kinetickou energii pohodlněji zapsat jako

$$\hat{T} = - \sum_{k=1}^{3N} \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}.$$

Hamiltonián pro systém o více částicích má stejný tvar jako hamiltonián pro jednu částici, tedy

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

jen potenciální energie \hat{V} teď bude složitější. Pro N částic bude hamiltonián nejen součtem kinetických a potenciálních energií každé z částic¹ ve vnějších polích, ale ještě přibudou interakční členy, které jsou dány potenciální energií, kterou mají částice, pokud na sebe navzájem působí, vůči sobě

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{T}_1 + \dots + \hat{T}_N}_{\text{kinetická energie}} + \underbrace{\hat{V}_1 + \dots + \hat{V}_N}_{\substack{\text{potenciální energie} \\ \text{každé částice ve vnějším poli}}} + \underbrace{\hat{V}_{12} + \dots + \hat{V}_{(N-1)N}}_{\text{vzájemná interakční energie}},$$

za předpokladu dvoučásticové interakce.

Úkol 8.1 Zkuste napsat hamiltonián pro systém dvou elektronů v atomu hélia.

¹Různé částice mohou mít obecně různou potenciální energii, i když se nacházejí ve stejném vnějším poli. Různé těžké balvany mají v tíhovém poli Země také různou potenciální energii!

8.1.3 Schrödingerova rovnice vícečásticových systémů

Nyní už víme, jak vypadá vlnová funkce pro systém více částic a známe operátory, které na takové funkce působí. Pojdme tyto poznatky nyní spojit a napsat Schrödingerovu rovnici pro systém více částic. Budeme se odkazovat na dříve odvozené výsledky v kapitole 2.4.2.

Vezmeme vícečásticovou vlnovou funkci a vícečásticový hamiltonián a obojí dosadíme do Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N). \quad (8.5)$$

Vidíme, že se nezměnilo nic zásadního, jen nám přibyla spousta proměnných v hledané funkci ψ . Řešení tak bude analogické tomu, které už jsme provedli pro jednočásticový systém.

Pokud hamiltonián nezávisí explicitně na čase, pak můžeme řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice hledat ve tvaru

$$\psi = R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) T(t),$$

kde $R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ je prostorová část vlnové funkce a $T(t)$ je její časový vývoj. Dosazením do nestacionární Schrödingerovy rovnice dostaneme (viz (2.69), (2.70)) tvar časového členu

$$T(t) = e^{\frac{Et}{i\hbar}}$$

a dále stacionární Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = ER(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N), \quad (8.6)$$

což je vlastně rovnice pro hledání vlastních čísel a vlastních stavů systému. Obecné řešení rovnice (8.5) pak stejně jako pro jednu částici dostaneme jako lineární kombinaci řešení stacionárních.

Schrödingerova rovnice pro tři neinteragující částice v obecném potenciálu v jedné dimenzi

Výpočtová úloha 8.1

Napište řešení Schrödingerovy rovnice pro 3 stejné neinteragující částice vázané na přímku (tj. uvažujte, že se jedná o jednodimenzionální problém), které se nacházejí ve vnějším poli popsáném potenciální energií $\hat{V} = V(x)$, která se nemění v čase.

Řešení:

Abychom se vyhnuli indexům, označíme si souřadnice částic x , y a z , i když se částice pohybují po jedné přímce. Hamiltonián bude mít tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z,$$

kde

$$\hat{H}_x = \hat{T}_x + \hat{V}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

a \hat{H}_y a \hat{H}_z budou mít obdobný tvar.

Hamiltonián nezávisí explicitně na čase, proto budeme řešit stacionární Schrödingerovu rovnici.

Prostorovou část vlnové funkce uvažujme ve tvaru

$$R(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z).$$

Dosadíme tento součinný tvar do stacionární Schrödingerovy rovnice a využijeme toho, že je hamiltonián separovatelný.

$$\begin{aligned} (\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z) R(x, y, z) &= E R(x, y, z) \\ (\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z) X(x)Y(y)Z(z) &= E X(x)Y(y)Z(z). \end{aligned}$$

Roznásobíme a funkce, které jsou vzhledem k dané části hamiltoniánu konstantní, vytkneme před hamiltonián.

$$\begin{aligned} Y(y)Z(z) [\hat{H}_x X(x)] + X(x)Z(z) [\hat{H}_y Y(y)] + X(x)Y(y) [\hat{H}_z Z(z)] \\ = E X(x)Y(y)Z(z) \end{aligned}$$

Celou rovnici vynásobíme výrazem $\frac{1}{X(x)Y(y)Z(z)}$:

$$\frac{Y(y)Z(z) [\hat{H}_x X(x)]}{X(x)Y(y)Z(z)} + \frac{X(x)Z(z) [\hat{H}_y Y(y)]}{X(x)Y(y)Z(z)} + \frac{X(x)Y(y) [\hat{H}_z Z(z)]}{X(x)Y(y)Z(z)} = E$$

a vytknuté funkce zkrátíme:

$$\frac{\hat{H}X(x)}{X(x)} + \frac{\hat{H}Y(y)}{Y(y)} + \frac{\hat{H}Z(z)}{Z(z)} = E = \text{konst. } \forall x, y, z.$$

Na levé straně rovnice máme tři výrazy, které závisí každý jen na jedné souřadnici a na pravé straně stojí konstanta E . Převědeme-li dva výrazy na pravou stranu ke konstantě E a zvolíme nějaké pevné y a z , bude výraz na pravé straně nějaká konstanta nezávislá na x ,

$$\frac{\hat{H}X(x)}{X(x)} = E - \frac{\hat{H}Y(y)}{Y(y)} - \frac{\hat{H}Z(z)}{Z(z)} \equiv E_x,$$

a výraz na levé straně musí být také konstantní. Tuto konstantu označíme E_x . Obdobnou úvahu provedeme i pro zbývající dva členy. Takto se nám celá rovnice rozpadne na tři dílčí rovnice, v každé už bude jen jedna proměnná

$$\begin{aligned}\hat{H}_x X(x) &= E_x X(x), \\ \hat{H}_y Y(y) &= E_y Y(y), \\ \hat{H}_z Z(z) &= E_z Z(z)\end{aligned}$$

a platí

$$E = E_x + E_y + E_z.$$

Celkové řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice pro tři částice v 1D by tedy bylo^a

$$\psi(x, y, z, t) = X(x)Y(y)Z(z) e^{\frac{(E_x + E_y + E_z)t}{i\hbar}}.$$

^aStejně by postup fungoval také pro úlohu, ve které by místo tří částic na přímce vystupovala jedna částice v prostoru, pokud by byl hamiltonián separovatelný. Pak by pojmenování souřadnic x, y, z bylo přirozené.

Tímto jsme vyřešili systém tří částic v jednodimenzionálním případě. Pro více částic by se vše provedlo analogicky.

Všimněme si, že naše řešení pro tři částice v 1D označením i způsobem řešení odpovídá řešení systému jedné částice ve 3D. Podobně řešení systému N částic v 1D odpovídá řešení systému o jedné částici v N dimenzích. Řešíme-li problém v našem trojrozměrném prostoru, můžeme řešení problému N částic ve 3D nahradit řešením problému jedné částice ve $3N$ dimenzích. Můžeme tedy volně přecházet mezi problémy

$$\begin{aligned}N \text{ částic v 1D} &\Leftrightarrow 1 \text{ částice v } N \text{ dimenzích}, \\ N \text{ částic ve 3D} &\Leftrightarrow 1 \text{ částice ve } 3N \text{ dimenzích}.\end{aligned}$$

S touto myšlenkou jsme se potkali už v teoretické mechanice při přechodu do konfiguračního prostoru.

Schrödingerova rovnice pro N volných neinteragujících částic**Výpočtová úloha 8.2**

Napište řešení Schrödingerovy rovnice pro N stejných volných neinteragujících částic. Uvažujte, že hamiltonián nezávisí explicitně na čase.

Řešení:

Při řešení využijeme výše uvedeného pozorování a převedeme si problém N částic ve trojrozměrném prostoru na problém jedné částice ve $3N$ dimenzích. Pro větší přehlednost na dalších řádcích nebudeme explicitně zdůrazňovat, že se jedná o funkci všech souřadnic $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_{3N})$, ale budeme psát jednoduše ψ . Částice jsou volné a neinteragující, hamiltonián je tedy roven kinetické energii

$$\hat{H} = \hat{T} = - \sum_{j=1}^{3N} \frac{\hbar^2}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}.$$

Díky tomu, že je hamiltonián neinteragujících částic separovatelný pro jednotlivé prostorové souřadnice x_j , můžeme dokonce prostorovou část vlnové funkce R hledat ve tvaru

$$R(x_1, x_2, x_3, \dots, x_{3N}) = R_1(x_1)R_2(x_2) \dots R_{3N}(x_{3N}),$$

kde $R_j(x_j)$ je prostorová část vlnové funkce jedné částice v jedné dimenzi. Vyřešíme-li stacionární Schrödingerovu rovnici (8.6), dostaneme pro jednu souřadnici rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} R_j(x_j) = E_j R_j(x_j)$$

a její řešení ve tvaru

$$R_j(x_j) = e^{ik_j x_j},$$

kde $k_j = \sqrt{\frac{2m_j E_j}{\hbar^2}}$ a $E_j = \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m_j}$ (viz řešení jedné částice v 1D v kapitole 2.2.6) .

Prostorová část vlnové funkce pak bude mít tvar

$$R(x_1, \dots, x_{3N}) = e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} e^{ik_3 x_3} \dots e^{ik_{3N} x_{3N}} = e^{i \left(\sum_{j=1}^{3N} k_j x_j \right)}.$$

Všechna řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice pak dostaneme jako lineární kombinaci řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\psi_\alpha = \sum_{\alpha} c_{\alpha} R_{\alpha}(x_1, \dots, x_{3N}) e^{\frac{E_{\alpha} t}{i\hbar}} = \sum_{\alpha} c_{\alpha} e^{i(\vec{k}^{(3N)} \cdot \vec{r}^{(3N)})} e^{\frac{E_{\alpha} t}{i\hbar}},$$

kde E_{α} je celková energie systému, tj. energie všech částic

$$E_{\alpha} = \sum_{j=1}^{3N} E_j$$

a platí

$$\vec{k}^{(3N)} \cdot \vec{r}^{(3N)} = \sum_{j=1}^{3N} k_j x_j.$$

Schrödingerova rovnice pro dvě neinteragující částice v kvadratickém potenciálu

Výpočtová úloha 8.3

Uvažujme jednodimenziální systém dvou stejně těžkých neinteragujících částic ve vnějším poli s kvadratickým průběhem potenciální energie. Sestavte hamiltonián, najděte řešení Schrödingerovy rovnice a povolené energie tohoto systému.

Řešení:

Každá částice má svoji kinetickou a potenciální energii, hamiltonián systému má tedy tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \hat{V}_1(x_1) + \hat{V}_2(x_2) + \cancel{\hat{V}_{12}(x_1, x_2)}. \quad (8.7)$$

Člen $\hat{V}_{12}(x_1, x_2)$ představuje vzájemnou interakční energii, kterou zde neuvažujeme, protože spolu částice neinteragují.

Z kapitoly 3.8 víme, že kvadratickou potenciální energii, která odpovídá lineárnímu harmonickému oscilátoru, píšeme ve tvaru

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

kde ω je parametr udávající „rozevření“ potenciální energie, a povolené energie lze vyjádřit jako $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, kde $n = 0, 1, 2, \dots$ je kvantové číslo příslušného stavu.

Dosadíme za kinetickou a potenciální energii do hamiltoniánu a provedeme jeho separaci:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2). \quad (8.8)$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2,$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2.$$

Dostaneme dvě rovnice

$$\hat{H}_1 R_1(x_1) = E_1 R_1(x_1),$$

$$\hat{H}_2 R_2(x_2) = E_2 R_2(x_2),$$

kde $R_j(x_j)$ pro $j \in \{1, 2\}$ je prostorová část jednočásticové vlnové funkce. Když roze-
píšeme hamiltonián, dostaneme pro každé x_j rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} R_j(x_j) + \frac{1}{2}m\omega^2 x_j^2 R_j(x_j) = E_j R_j(x_j), \quad j \in \{1, 2\}. \quad (8.9)$$

Rovnici tohoto tvaru jsme už vyřešili v kapitole 3.8. Při jejím řešení jsme přešli k bezrozměrné souřadnici $\xi = \frac{x}{x_0}$, kde $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Dále proto místo x_1 , resp. x_2 budeme používat ξ_1 , resp. ξ_2 , abychom nemuseli ve výrazech vypisovat zmíněnou substituci. Tvar řešení tím nebude ovlivněn, řešení bude mít jen jiné měřítko na vodorovné ose, než kdybychom použili původní proměnné.

Řešení lineárního harmonického oscilátoru má tvar

$$\psi_n = H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

kde $H_n(\xi)$ je *Hermitův polynom* a n je kvantové číslo dané energetické hladiny.

Jednočásticová prostorová vlnová funkce pak má tvar

$$(R_j(\xi_j))_n = H_{n_j}(\xi_j) e^{-\frac{\xi_j^2}{2}}.$$

8.1. ROZŠÍŘENÍ POSTULÁTŮ KVANTOVÉ MECHANIKY NA SYSTÉM S VÍCE ČÁSTICEMI 259

Celkovou prostorovou část vlnové funkce pak dostaneme jako

$$R(\xi_1, \xi_2) = R_1(\xi_1)R_2(\xi_2) = H_{n_1}(\xi_1) H_{n_2}(\xi_2) e^{-\frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2}}$$

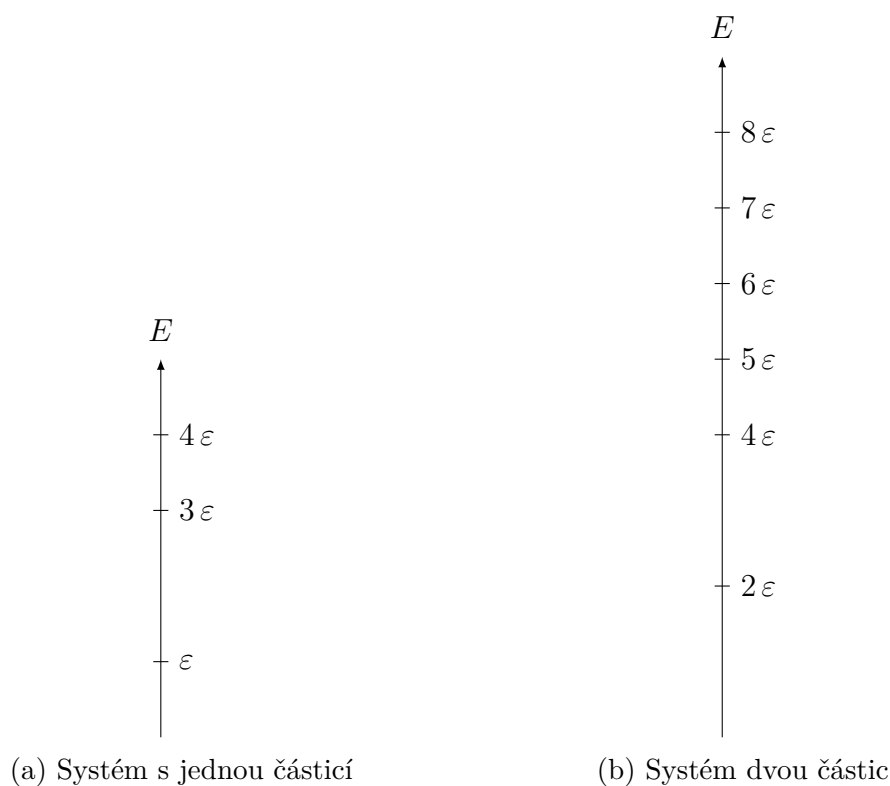
a celkové řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice jako

$$\Psi = \sum_{\alpha} c_{\alpha} R_{\alpha} e^{\frac{E_{\alpha} t}{i\hbar}} = \sum_{n_1 n_2} c_{n_1 n_2} \left[H_{n_1}(\xi_1) H_{n_2}(\xi_2) e^{-\frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2}} \right] e^{\frac{E_{n_1} + E_{n_2}}{i\hbar} t} .$$

Nyní zkusme znázornit energetické hladiny systému dvou stejných neinteragujících částic z předchozí úlohy. Vyřešme nejprve následující návodnou úlohu:

Úkol 8.2 Uvažujme jednočásticový systém, který má tři povolené energetické hladiny, jak ukazuje obrázek 8.1 vlevo. Napište hodnoty energií energetických hladin dvoučásticového systému, který vznikne ze stávajícího přidáním další stejné částice. Předpokládejte, že spolu částice neinteragují.

Vraťme se nyní k předchozí úloze a pokusme se napsat prvních několik hladin systému



Obrázek 8.1: Schéma povolených hladin k úkolu 8.2

dvou částic v kvadratickém potenciálu. Budeme postupovat stejně jako v předchozím úkolu. Energie jedné částice je dána vztahem

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

energie dvou částice pak bude

$$E = E_1 + E_2 = \hbar\omega \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega (n_1 + n_2 + 1).$$

Opět sestavíme tabulku, tentokrát ale do záhlaví uvedeme kvantová čísla

E	$n_1 = 0$	$n_1 = 1$	$n_1 = 2$	$n_1 = 3$	$n_1 = 4$	\dots
$n_2 = 0$	$\hbar\omega$	$2\hbar\omega$	$3\hbar\omega$	$4\hbar\omega$	$5\hbar\omega$	\dots
$n_2 = 1$	$2\hbar\omega$	$3\hbar\omega$	$4\hbar\omega$	$5\hbar\omega$	$6\hbar\omega$	\dots
$n_2 = 2$	$3\hbar\omega$	$4\hbar\omega$	$5\hbar\omega$	$6\hbar\omega$	$7\hbar\omega$	\dots
$n_2 = 3$	$4\hbar\omega$	$5\hbar\omega$	$6\hbar\omega$	$7\hbar\omega$	$8\hbar\omega$	\dots
$n_2 = 4$	$5\hbar\omega$	$6\hbar\omega$	$7\hbar\omega$	$8\hbar\omega$	$9\hbar\omega$	\dots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots

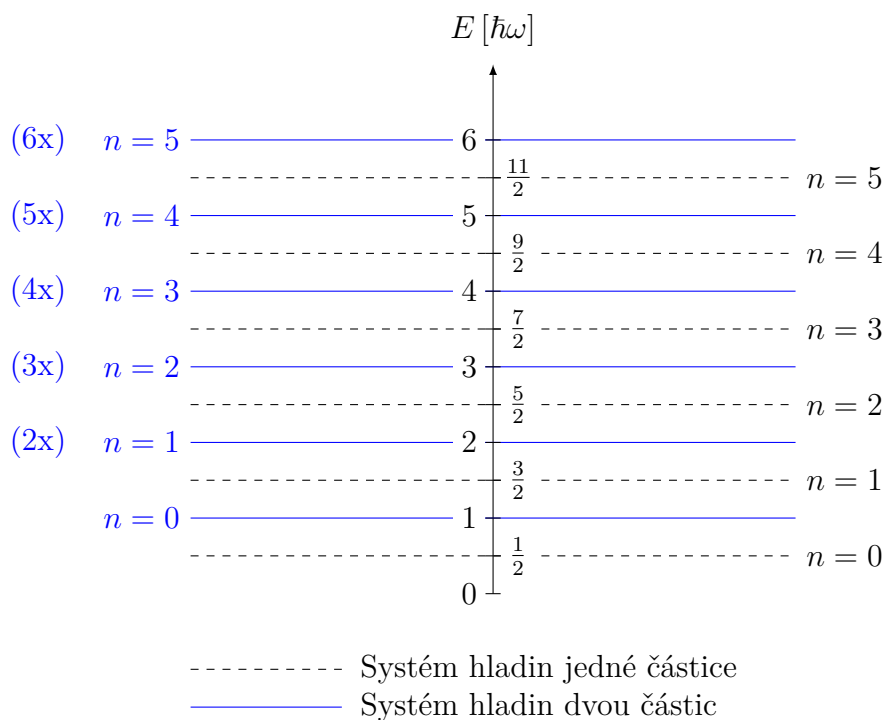
a vypočtené energie zakreslíme do schématu jako na obrázku 8.2.

Vidíme, že energetické hladiny systému dvou částic jsou ekvidistantní, stejně jako tomu bylo u jedné částice. Všechny hladiny vyšší než hladina základního stavu jsou degenerované, násobnost degenerace je vidět z tabulky na vedlejších diagonálách. Pro lepší představu je diagonála pro $4\hbar\omega$ vyznačena šedě, tato hladina je čtyřikrát degenerovaná. Stupeň degenerace je také uveden na obrázku 8.2 a platí pro něj, že když $E = n\hbar\omega$, tak je stupeň degenerace $n + 1$.

8.2 Nerozlišitelnost částic

8.2.1 Princip nerozlišitelnosti částic

V přírodě se často setkáváme s částicemi stejného druhu – například s elektrony v atomovém obalu. Tyto částice nejenže mají stejnou hmotnost, náboj a další vlastnosti, dokonce je od sebe nemůžeme ani nijak jinak rozeznat – udělat si na ně značku, nebo je sledovat jako



Obrázek 8.2: Povolené energie systému dvou neinteragujících částic v kvadratickém potenciálu (modře), stupeň degenerace je uveden vlevo. Pro porovnání jsou čárkovaně uvedeny povolené energie jedné částice ve stejném potenciálu.

opičky ve výběhu, u kterých můžeme stále vědět, která je která, i když vypadají stejně. Proto mluvíme o *identických částicích*, které jsou *principiálně nerozlišitelné*.³

Tuto skutečnost musíme přidat do našeho systému postulátů pro systémy více částic. Dříve jsme se jí nemuseli zabývat, protože jsme řešili problémy pouze s jednou částicí. Nový postulát můžeme zformulovat takto:

Neexistuje způsob, jak v experimentu odlišit dvě částice stejného typu.

Zkusme se zamyslet, jestli podmínka nerozlišitelnosti nějak ovlivní vlnové funkce, kterými můžeme takový systém popisovat. Pro jednoduchost nyní uvažujme jen dvě identické neinteragující částice. Stav, kdy se první částice nachází v jednočásticovém stavu A a druhá částice ve stavu B označíme

$$\Psi_1(x_1, x_2) = \psi_A(x_1)\psi_B(x_2),$$

³V angličtině je to hezky vidět na užívání určitého a neurčitého členu se slovem *elektron*: Postrádá smyslu říkat *the electron* nebo *this electron*, tedy „ten jeden určitý konkrétní elektron,“ na místo toho se užívá neurčitého členu *an electron*, což je v souladu jak s anglickou gramatikou, tak s fyzikální praxí.

stav, kdy se první částice nachází ve stavu B a druhá částice ve stavu A označíme

$$\Psi_2(x_1, x_2) = \psi_A(x_2)\psi_B(x_1).$$

Pokud částice skutečně nelze rozlišit, pak musí být stavy Ψ_1 a Ψ_2 fyzikálně totožné⁴. Kdyby nebyly, uměli bychom rozlišit, která částice je ve kterém stavu, a to je ve sporu s předpokládanou nerozlišitelností částic. Pokud jsou Ψ_1 a Ψ_2 normované, musí platit

$$|\psi_A(x_1)\psi_B(x_2)|^2 = |\psi_A(x_2)\psi_B(x_1)|^2. \quad (8.10)$$

Podívejme se nyní, zda výše uvedená obecná řešení Schrödingerovy rovnice Ψ_1 a Ψ_2 vyhovují podmínce (8.10), tj. můžeme je použít i v případě, že se jedná o identické částice.

Úkol 8.3 Vezměme například jednorozměrnou nekonečně hlubokou pravoúhlou potenciálovou jámu šířky L , pro kterou jednočásticové řešení dobře známe, a umístíme do ní dvě identické částice. Ověřte, jestli funkce

$$\begin{aligned} \Psi_1(x_1, x_2) &= \psi_A(x_1)\psi_B(x_2) & \begin{cases} 1. \text{ částice: základní stav (ozn. } A) \\ 2. \text{ částice: první excitovaný stav (ozn. } B) \end{cases} \\ \Psi_2(x_1, x_2) &= \psi_A(x_2)\psi_B(x_1) & \begin{cases} 1. \text{ částice: první excitovaný stav} \\ 2. \text{ částice: základní stav} \end{cases} \end{aligned}$$

splňují požadavek nerozlišitelnosti částic (8.10).

Nápověda: Zkuste ověřit rovnost hustot pravděpodobnosti pro jednu konkrétní volbu x_1, x_2 .

Úkol 8.4 Ověřte, že funkce (8.11) a (8.12) splňují požadavek nerozlišitelnosti (8.10).

Na konkrétním příkladu jsme ukázali, že zvolíme-li pro popis systému dvou nerozlišitelných částic symetrickou nebo antisymetrickou vlnovou funkci, pak bude pro tento popis vyhovovat, tj. bude splňovat požadavek nerozlišitelnosti. Pojdme nyní dokázat obecně, že to platí pro každý systém (dosud jsme pracovali pouze se dvěma částicemi v jednorozměrné pravoúhlé nekonečné potenciálové jámě), a navíc, že žádná jiná než symetrická nebo antisymetrická funkce nebude vyhovovat. Jinými slovy chceme dokázat ekvivalenci

⁴Stavy jsou fyzikálně totožné, pokud se vlnové funkce liší pouze o multiplikatívni konstantu. Pro normované funkce pak dostaneme právě podmínku (8.10).

Vlnová funkce splňuje požadavek nerozlišitelnosti \Leftrightarrow je symetrická, nebo antisymetrická vůči prohození souřadnic libovolné dvojice částic.

Zavedeme si operátor, který popisuje situaci, že si dvě částice vymění místo, takzvaný *operátor prohození*, označme ho $\hat{\mathcal{P}}_{jk}$, kde indexy j a k označují částice, které operátor „prohodí“. Uvažujme vlnovou funkci, která popisuje systém N nerozlišitelných částic

$$\psi = \psi(x_1, x_2, \dots, x_N).$$

Budeme se nyní zabývat situací, kdy si místa prohazují první a druhá částice. Naším operátorem tak bude $\hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}_{12}$. Pokud na funkci zapůsobíme operátorem prohození, musíme díky principu nerozlišitelnosti dostat opět stejný stav. Tedy výsledná vlnová funkce se bude od původní lišit maximálně o multiplikační konstantu λ

$$\hat{\mathcal{P}}_{12} \psi(x_1, x_2, \dots) = \psi(x_2, x_1, \dots) = \lambda \psi(x_1, x_2, \dots). \quad (8.13)$$

Pokud na funkci zapůsobíme operátorem prohození podruhé, dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}_{12} \psi(x_1, x_2, \dots) &= \psi(x_2, x_1, \dots) \\ &= \lambda \psi(x_1, x_2, \dots) && / \hat{\mathcal{P}} \\ \hat{\mathcal{P}}_{12}^2 \psi(x_1, x_2, \dots) &= \hat{\mathcal{P}}_{12} \psi(x_2, x_1, \dots) = \psi(x_1, x_2, \dots) \\ &= \lambda \hat{\mathcal{P}}_{12} \psi(x_1, x_2, \dots) = \lambda^2 \psi(x_1, x_2, \dots), \end{aligned}$$

kde na prvním řádku jsme použili to, že $\hat{\mathcal{P}}_{12}^2$ prohazuje částice a na druhém řádku, že působením $\hat{\mathcal{P}}_{12}^2$ dostaneme díky nerozlišitelnosti λ^2 -násobek funkce ψ .

Odtud už je vidět, že platí

$$\lambda^2 \psi(x_1, x_2, \dots) = \psi(x_1, x_2, \dots),$$

z toho plyne

$$\lambda = \pm 1.$$

Pro splnění principu nerozlišitelnosti částic musíme tedy požadovat, aby vlnové funkce vícečásticových systémů splňovaly tzv. *požadavek symetrie*:

$$\psi(x_1, x_2, \dots) = \pm \psi(x_2, x_1, \dots). \quad (8.14)$$

Použitím operátorů prohození mezi dalšími částicemi bychom pak dostali obecný požadavek symetrie

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \pm \psi(P(x_1), P(x_2), \dots, P(x_N)), \quad (8.15)$$

kde P je libovolná permutace částic.

To je ekvivalentní našemu fyzikálnímu požadavku (8.10), totiž aby hustota pravděpodobnosti určená z vlnových funkcí, které se liší jen prohozením částic, byla stejná.

Ukázali jsme tedy, že pokud vlnová funkce systémů identických částic vyhovuje principu nerozlišitelnosti, musí být buď symetrická, nebo antisymetrická. Obrácená implikace, tj. že symetrické a antisymetrické vlnové funkce splňují požadavek nerozlišitelnosti, je patrná na první pohled. Z experimentů víme, že neexistují částice, které by mohly mít obě varianty – tj. mít někdy symetrickou a jindy antisymetrickou vlnovou funkci.

Částice, které mají symetrickou vlnovou funkci, nazýváme *bosony*, částice, které mají antisymetrickou vlnovou funkci, nazýváme *fermiony*. Mezi bosony patří například fotony, gluony, Z-bosony, W-bosony; možná jste slyšeli také o Higgsově bosonu. Všechny tyto částice se navzájem liší hmotností, nábojem a dalšími vlastnostmi. To, co mají společné, je *celočíslný spin*, tj. např. spin 0, 1, a symetričnost vlnové funkce. Naproti tomu mezi fermiony patří částice jako je elektron, proton, neutrino, pozitron, tauon a mnoho dalších částic. Jejich společnou vlastností je tzv. *polocelý spin*, nejčastěji spin $\frac{1}{2}$ (ale i $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$, atd.), a antisymetrická vlnová funkce.

8.2.2 Pauliho vylučovací princip

Nyní prozkoumejme, situaci, kdy se dvě částice nachází v nějakém systému obě ve stejném stavu. Rozdělme si naše úvahy na tři případy:

1. Různé částice

Slovním spojením *různé částice* zde myslíme částice *rozlišitelné*. Mohl by to být fermion a boson, dva různé fermiony (například elektron a proton) nebo dva různé bosony (například foton a gluon). Vlnová funkce dvou rozlišitelných částic, kdy jedna je ve stavu A a druhá ve stavu B vypadá obecně takto:

$$\psi = c_1 \psi_A(\vec{r}_1) \psi_B(\vec{r}_2) + c_2 \psi_A(\vec{r}_2) \psi_A(\vec{r}_1).$$

Nemusí být symetrická ani antisymetrická, proto jsou c_1 a c_2 libovolné komplexní konstanty. Pokud $\psi_A = \psi_B$, pak dostaneme

$$\psi = c_1 \psi_A(\vec{r}_1) \psi_A(\vec{r}_2) + c_2 \psi_A(\vec{r}_2) \psi_A(\vec{r}_1) = (c_1 + c_2) \psi_A(\vec{r}_1) \psi_A(\vec{r}_2)$$

má pro $c_1 + c_2 \neq 0$ dobrý fyzikální smysl i v případě, že jsou obě částice popsány stejnou vlnovou funkcí.⁵

2. Identické bosony

Vlnová funkce bosonů je symetrická,

$$\psi = \psi_A(\vec{r}_1)\psi_B(\vec{r}_2) + \psi_A(\vec{r}_2)\psi_B(\vec{r}_1).$$

Podíváme se, jestli je taková vlnová funkce přípustná i v případě, že jsou obě částice ve stejném stavu, tedy že $\psi_A = \psi_B$:

$$\psi_A = \psi_B \implies \psi = 2\psi_A(r_1)\psi_A(r_2).$$

Vidíme, že vlnová funkce, kterou jsme získali, je přípustná. Můžeme tedy říct, že bosony spolu mohou existovat v jednom systému ve stejném stavu a „vůbec jim to nevadí“.

3. Identické fermiony

Jak to dopadne pro fermiony? Postup bude naprosto analogický. Fermiony mají antisymetrickou vlnovou funkci, tedy

$$\psi = \psi_A(r_1)\psi_B(r_2) - \psi_A(r_2)\psi_B(r_1)$$

a po dosazení stejného stavu obou částic dostaneme

$$\psi_A = \psi_B \implies \psi = \psi_A(r_1)\psi_A(r_2) - \psi_A(r_2)\psi_A(r_1) = 0.$$

Vidíme, že pokud by oba fermiony zaujímaly stejný stav, pak bychom dostali nulovou vlnovou funkci, o které ale víme, že nereprezentuje žádný existující stav. To znamená, že v jednom systému (např. atomu) nemohou fermiony existovat v jednom a též stavu!

Naše pozorování je obsahem tzv. *Pauliho vylučovacího principu*, který je vlastně jen důsledkem postulátu o nerozlišitelnosti částic:

⁵Zjednodušeně bychom mohli říci, jsou obě částice ve stejném jednočásticovém stavu. U dvou částic různého druhu – například elektronu a protonu – je ale toto vyjádření mírně problematické, protože ve vlnové funkci se obvykle vyskytuje hmotnost, náboj či další vlastnosti dané částice. Pokud se v nich uvažované částice liší, může se stát, že neexistuje vlnová funkce, která by mohla popisovat jednočásticový stav obou částic, tj. nemohou být ve stejném stavu. Rozmyslete, jak vypadají povolené energie a vlastní vlnové funkce pro dvě různě těžké částice v kvadratickém potenciálu (tj. v harmonickém oscilátoru).

Pokud by se jednalo o částice stejného druhu, např. elektron a pozitron a uvažovali bychom situaci, ve které nepůsobí elektrická síla, pak by měly určité stejné stavy, tj. popisovali bychom elektron i pozitron stejnými vlnovými funkcemi). Ale protože jsou navzájem v principu rozlišitelné (právě pomocí elektromagnetické interakce), tak by pro ně plně platil uvedený odstavec, včetně vyjádření, že obě částice mohou být ve stejném jednočásticovém stavu.

Dva fermiony nemohou být v jednom systému ve stejném stavu.

8.2.3 „Výměnná interakce“

Pro lepší představu se pojďme podívat, jak vypadá rozložení hustoty pravděpodobnosti nalezení částic⁶, které mají symetrickou, či antisymetrickou vlnovou funkci v nekonečně čtvercové potenciálové jámě délky L .

Víme, že jednočásticové vlnové funkce odpovídající dvěma nejnižším stavům v nekonečně jednodimenzionální potenciálové jámě mají tvar

$$\begin{aligned}\psi_A(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) && \text{jednočásticový základní stav,} \\ \psi_B(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) && \text{jednočásticový 1. excitovaný stav.}\end{aligned}$$

Vlnová funkce pro dvě nerozlišitelné částice, kdy jedna z částic zaujímá jednočásticový základní stav a druhá jednočásticový první excitovaný stav, pak může mít následující dva tvary⁷

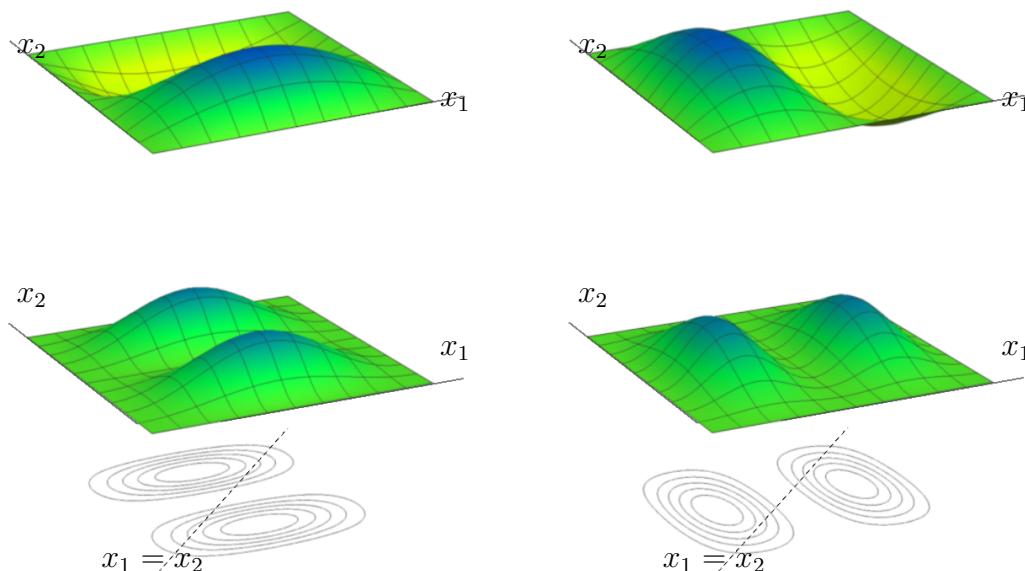
$$\begin{aligned}\Psi_s(x_1, x_2) &= \psi_A(x_1)\psi_B(x_2) + \psi_A(x_2)\psi_B(x_1) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{L} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) + \sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right) \right] && \text{symetrická,} \\ \Psi_a(x_1, x_2) &= \psi_A(x_1)\psi_B(x_2) - \psi_A(x_2)\psi_B(x_1) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{L} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) - \sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right) \right] && \text{antisymetrická.}\end{aligned}$$

Na obrázcích níže je vidět, že symetrická vlnová funkce (graf na obr. 8.4 (a)) vznikla jako součet vlnových funkcí rozlišitelných částic (obr. 8.3), zatímco antisymetrická vlnová funkce (obr. 8.4 (b)) je dána jejich rozdílem.

Ve stavu popisovaném symetrickou vlnovou funkcí je maximum v bodech $x_1 = x_2 = \frac{L}{2}$ nebo $x_1 = x_2 = \frac{3L}{4}$. Dále jsou místa s vysokou hustotou pravděpodobnosti blízko u diagonály

⁶Slovní spojení *výměnná interakce* (angl. *exchange forces/interaction*) se používá pro popis rozložení hustoty pravděpodobnosti nerozlišitelných částic. Níže odvozené výsledky jsou důsledkem nerozlišitelnosti částic, ale připomínají nám klasické „přitahování“ a „odpuzování“, i když ve skutečnosti o žádnou silovou interakci nejde. V názvu však slovo „interakce“ zůstalo.

⁷Tyto funkce popisují první excitovaný stav v případě, že jde o bosony, ale základní stav, pokud jde o fermiony (zatím neuvažujeme spin). Oba tyto stavy mají stejnou energii, proto je volíme pro porovnávání hustoty pravděpodobnosti v těchto dvou případech.

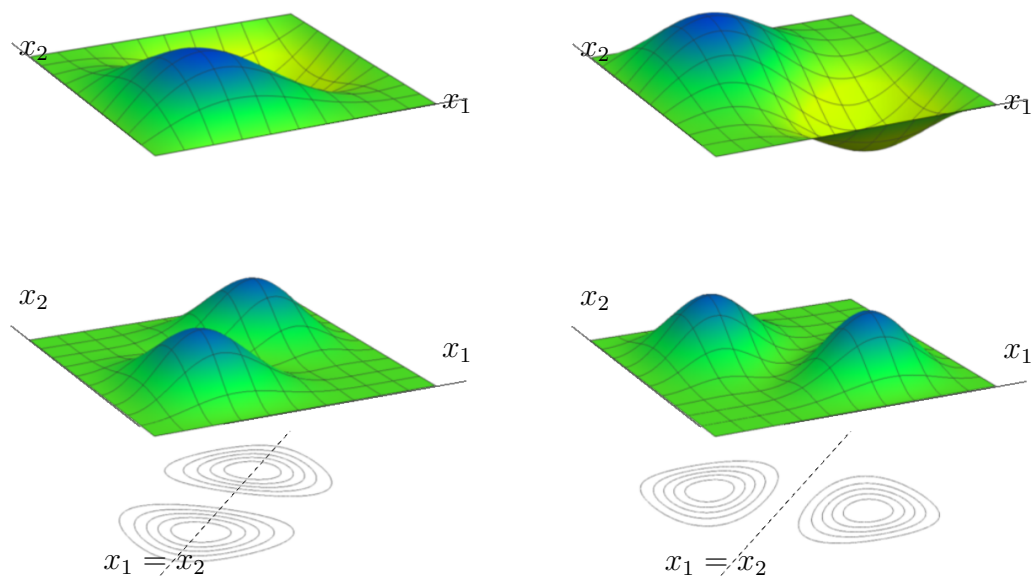


Obrázek 8.3: Vlnová funkce a hustota pravděpodobnosti dvou rozlišitelných částic v **jednodimenzionální** nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě.

Horní zelený graf znázorňuje vlnovou funkci, spodní zelený graf hustotu pravděpodobnosti a vrstevnicový graf v dolní části obrázku zachycuje strmost horního i spodního grafu.

$x_1 = x_2$, což odpovídá situacím, kdy jsou částice blízko sebe. V antisymetrickém případě je na diagonále odpovídající $x_1 = x_2$ hustota pravděpodobnosti nulová a kolem ní nízká, vysokých hodnot nabývá v místech, kde se od sebe hodnoty x_1 a x_2 výrazně liší – částice jsou daleko od sebe. Vypadá to tedy, jako by měly částice se symetrickou vlnovou funkcí tendenci být blízko u sebe (mít stejnou souřadnici), což připomíná „přitahování“ a naopak částice s antisymetrickou vlnovou funkcí se vyskytují dále od sebe, tj. jako by se „odpuzovaly“. Používáme zde slova, která v klasické fyzice používáme pro silové účinky. Musíme si ale uvědomit, že zde o žádné skutečné silové působení, o žádné opravdové „přitahování“ či „odpuzování“ nejde – toto chování je čistě důsledkem nerozlišitelnosti částic (matematictěji – našeho požadavku na symetrii vlnové funkce).

Graficky jsme prozkoumali jeden konkrétní případ. Pojďme nyní napočítat obecně, zda se bude nějak lišit střední kvadratická vzdálenost dvou neinteragujících částic v případech, kdy se jedná o rozlišitelné částice, identické bosony, nebo identické fermiony.



(a) Symetrická vlnová funkce

(b) Antisymetrická vlnová funkce

Obrázek 8.4: Vlnová funkce a hustota pravděpodobnosti dvou identických částic v nekonečné čtvercové pravoúhlé potenciálové jámě

Výpočtová úloha 8.4

Určete střední vzdálenost dvou neinteragujících částic v jednodimenzionálním případě.

Řešte pro tři případy:

- rozlišitelné částice: $\Psi(x_1, x_2) = \psi_A(x_1)\psi_B(x_2)$,
- identické bosony: $\Psi_s(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_A(x_1)\psi_B(x_2) + \psi_A(x_2)\psi_B(x_1)]$,
- identické fermiony: $\Psi_a(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_A(x_1)\psi_B(x_2) - \psi_A(x_2)\psi_B(x_1)]$,

kde ψ_A a ψ_B jsou libovolné jednočásticové stavy a x_1, x_2 jsou souřadnice obou částic.

Řešení:

Nechť jsou pro jednoduchost dalších výpočtů uvažované dva jednočásticové stavy ortonormální, tedy $\langle \psi_A | \psi_B \rangle = 0$, a necht' jsou obě funkce normované. Naším úkolem je

určit střední kvadratickou hodnotu vzdálenosti obou částic, tedy hodnotu výrazu

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &\equiv \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\Psi(x_1, x_2)} = \langle x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 \rangle_{\Psi} \\ &= \langle x_1^2 \rangle_{\Psi} - 2\langle x_1x_2 \rangle_{\Psi} + \langle x_2^2 \rangle_{\Psi}. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Rozlišitelné částice Budeme postupně počítat jednotlivé členy z výrazu (8.16).

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle_{\Psi(x_1, x_2)} &= \langle \Psi | x_1^2 \Psi \rangle = \int_{x_1} \int_{x_2} \psi_A^*(x_1) \psi_B^*(x_2) x_1^2 \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \underbrace{\int_{x_1} \psi_A^*(x_1) x_1^2 \psi_A(x_1) dx_1}_{\langle x_1^2 \rangle_{\psi_A(x_1)} \equiv \langle x_1^2 \rangle_{\psi_A}} \underbrace{\int_{x_2} \psi_B(x_2) \psi_B^*(x_2) dx_2}_{|\psi_B(x_2)|^2=1} \\ &= \langle x_1^2 \rangle_{\psi_A} \equiv \langle x_1^2 \rangle_A. \end{aligned}$$

Podobně vypočteme

$$\langle x_2^2 \rangle_{\Psi(x_1, x_2)} = \dots = \langle x_2^2 \rangle_B$$

a

$$\langle x_1x_2 \rangle_{\Psi(x_1, x_2)} = \dots = \langle x_1 \rangle_A \langle x_2 \rangle_B.$$

Když tedy dosadíme do vztahu (8.16) pro střední hodnotu vzdálenosti, dostaneme

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\Psi(x_1, x_2)} = \langle x_1^2 \rangle_A + \langle x_2^2 \rangle_B - 2\langle x_1 \rangle_A \langle x_2 \rangle_B.$$

Identické částice Tentýž výpočet teď provedeme pro bosony a fermiony, ten bude o malinko delší. A protože pro bosony i fermiony je výpočet velmi podobný, provedeme jej najednou. Píšeme rovnou místo Ψ_s nebo Ψ_a dohromady $\Psi_{s,a}$,

$$\Psi_{s,a} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_A(x_1)\psi_B(x_2) \pm \psi_A(x_2)\psi_B(x_1)],$$

kde s odpovídá bosonům (symetrická vlnová funkce) a a fermionům (antisymetrická vlnová funkce).

Nejprve spočteme první člen ve výrazu (8.16):

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle_{\psi_{s,a}} &= \langle \psi_{s,a} | x_1^2 \psi_{s,a} \rangle = \frac{1}{2} \int_{x_1} \int_{x_2} \psi_A^*(x_1) \psi_B^*(x_2) x_1^2 \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) dx_1 dx_2 \\ &\quad \pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \int_{x_2} \psi_A^*(x_1) \psi_B^*(x_2) x_1^2 \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) dx_1 dx_2 \\ &\quad \pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \int_{x_2} \psi_A^*(x_2) \psi_B^*(x_1) x_1^2 \psi_A(x_1) \psi_B(x_2) dx_1 dx_2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{x_1} \int_{x_2} \psi_A^*(x_2) \psi_B^*(x_1) x_1^2 \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) dx_1 dx_2 \end{aligned}$$

Rozdělíme integrály podle proměnné a využijeme ortonormalitu funkcí ψ_A a ψ_B .

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_A^*(x_1) \psi_A(x_1) x_1^2 dx_1 \underbrace{\int_{x_2} \psi_B^*(x_2) \psi_B(x_2) dx_2}_1 \\ &\quad \pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_A^*(x_1) \psi_B^*(x_1) x_1^2 dx_1 \underbrace{\int_{x_2} \psi_B^*(x_2) \psi_A(x_2) dx_2}_0 \\ &\quad \pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_B^*(x_1) \psi_A(x_1) x_1^2 dx_1 \underbrace{\int_{x_2} \psi_A^*(x_2) \psi_B(x_2) dx_2}_0 \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_B^*(x_1) \psi_B(x_1) x_1^2 dx_1 \underbrace{\int_{x_2} \psi_A^*(x_2) \psi_A(x_2) dx_2}_1 \\ &= \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_A^*(x_1) \psi_A(x_1) x_1^2 dx_1 \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_B^*(x_1) \psi_B(x_1) x_1^2 dx_1 \\ &= \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B) . \end{aligned}$$

Při integraci přes x_2 jsme využili normovanosti ψ_A a ψ_B , což dá v prvním a v posledním členu jedničku, a také ortogonalitu obou funkcí, což dá ve druhém a ve třetím členu nulu.

Pro x_2 dostaneme stejný vztah. Proto už dále označujeme $x_1 = x_2 = x$.

$$\langle x_1^2 \rangle_{\Psi_{s,a}} = \langle x_2^2 \rangle_{\Psi_{s,a}} = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B) .$$

A analogickými úpravami spočítáme ještě člen $\langle x_1 x_2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle x_1 x_2 \rangle_{\psi_{s,a}} &= \langle \psi_{s,a} | x_1 x_2 \psi_{s,a} \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \underbrace{\int_{x_1} \psi_A^*(x_1) \psi_A(x_1) x_1 dx_1}_{\langle x \rangle_A} \underbrace{\int_{x_2} \psi_B^*(x_2) \psi_B(x_2) x_2 dx_2}_{\langle x \rangle_B} \\
 &\pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_A^*(x_1) \psi_B(x_1) x_1 dx_1 \int_{x_2} \psi_B^*(x_2) \psi_A(x_2) x_2 dx_2 \\
 &\pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_B^*(x_1) \psi_A(x_1) x_1 dx_1 \int_{x_2} \psi_A^*(x_2) \psi_B(x_2) x_2 dx_2 \\
 &+ \frac{1}{2} \underbrace{\int_{x_1} \psi_B^*(x_1) \psi_B(x_1) x_1 dx_1}_{\langle x \rangle_B} \underbrace{\int_{x_2} \psi_A^*(x_2) \psi_A(x_2) x_2 dx_2}_{\langle x \rangle_A} \\
 &= \frac{1}{2} (\langle x \rangle_A \langle x \rangle_B + \langle x \rangle_B \langle x \rangle_A) \\
 &\pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_A^*(x_1) \psi_B(x_1) x_1 dx_1 \int_{x_2} \psi_B^*(x_2) \psi_A(x_2) x_2 dx_2 \\
 &\pm \frac{1}{2} \int_{x_1} \psi_B^*(x_1) \psi_A(x_1) x_1 dx_1 \int_{x_2} \psi_A^*(x_2) \psi_B(x_2) x_2 dx_2
 \end{aligned}$$

Vidíme, že tentokrát se členy, kde se míchají stavy A a B v jednom integrálu, nevynuly. Označme je tedy jako

$$\int_x \psi_A^*(x) \psi_B(x) x dx \equiv \langle x \rangle_{AB},$$

platí

$$\langle x \rangle_{AB} = \langle x \rangle_{BA}^*.$$

Pozor, nejde o střední hodnotu, i když je označení podobné. Je to člen, který jsme dostali na základě symetrie (antisymetrie) vlnových funkcí, a který může za to, že je chování nerozlišitelných částic jiné než chování rozlišitelných částic, jak uvidíme dále. Můžeme tedy dokončit výpočet:

$$\begin{aligned}
 \langle x_1 x_2 \rangle_{\psi_{s,a}} &= \frac{1}{2} (\langle x \rangle_A \langle x \rangle_B + \langle x \rangle_B \langle x \rangle_A \pm \langle x \rangle_{AB} \langle x \rangle_{BA} \pm \langle x \rangle_{BA} \langle x \rangle_{AB}) \\
 &= \frac{1}{2} (2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B \pm 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2) \\
 &= \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B \pm |\langle x \rangle_{AB}|^2.
 \end{aligned}$$

Dostáváme tedy

$$\langle x_1 x_2 \rangle_{\Psi_{s,a}} = \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B \pm |\langle x \rangle_{AB}|^2 .$$

Střední hodnota vzdálenosti obou částice pak bude

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\Psi_{s,a}} = \langle x_1^2 \rangle_A + \langle x_2^2 \rangle_B - 2 \langle x_1 \rangle_A \langle x_2 \rangle_B \mp 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 .$$

Shrneme-li tedy naše výpočty, dostaneme následující výsledky:

Rozlišitelné částice

$$\langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B = (\Delta x)^2 ,$$

Identické bosony

$$\langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B - 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 = (\Delta x)^2 - 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 ,$$

Identické fermiony

$$\langle x^2 \rangle_A + \langle x^2 \rangle_B - 2 \langle x \rangle_A \langle x \rangle_B + 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 = (\Delta x)^2 + 2 |\langle x \rangle_{AB}|^2 .$$

Naše výpočty se shodují s předchozím pozorováním. Bosony mají střední vzdálenost v průměru menší než rozlišitelné částice, protože oproti rozlišitelným částicím odečítáme ještě člen $2 |\langle x \rangle_{AB}|^2$, naopak u fermionů se poslední člen vyskytuje s plusem, takže mají střední vzdálenost větší, přesně jako kdyby se odpuzovaly. Ještě jednou zopakujme, že nejde o přitahování či odpuzování v pravém slova smyslu, ale jen o připodobnění k chování částic, které známe z našeho světa.

8.3 Přidání spinu

Nyní se podíváme podrobněji na systémy více částic se spinem. Až dosud jsme vlnovou funkci chápali jako celek a nerozlišovali jsme její prostorovou a spinovou část. To je také důvodem, proč vše, co jsme odvodili výše, zůstává v platnosti. Pro tuto chvíli budeme celkovou vlnovou funkci jedné částice Ψ brát jako součin její prostorové části $\Psi^{(\text{prostor})}$ a spinové části $\chi^{(\text{spin})}$

$$\Psi^{(\text{celková})} = \Psi^{(\text{prostor})} \chi^{(\text{spin})} ,$$

$$\Psi^{(\text{celková})}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, s_1, \dots, s_n) = \Psi^{(\text{prostor})}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \chi^{(\text{spin})}(s_1, \dots, s_n) .$$

Funkce $\chi(s)$ je zvláštní tím, že každá její proměnná je z diskrétního definičního oboru, tj. například pro částice se spinem $\frac{1}{2}$ může každá proměnná nabývat pouze hodnot $\pm \frac{\hbar}{2}$.

8.3.1 Skládání spinu $\frac{1}{2}$

Pojďme se nyní na problematiku popisu systému dvou částic se spinem podívat podrobněji. Použijeme aparát lineární algebry, který jsme pro popis spinu používali v kapitole 6 a doplníme ho tak, abychom pomocí něj mohli popisovat i systémy o více částicích.

Částice se spinem $\frac{1}{2}$ mají dvě možnosti průmětu spinu – k popisu nám tedy stačí dvoudimenzionální vektorový prostor V_n , kde $n = 2$. Pro popis stavu částice používáme dvousložkové vektory, tzv. *spinory*, a operátory na tomto prostoru reprezentujeme maticemi 2×2 . Operátory průmětu spinu jedné částice do jednotlivých os mají tvar

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Vezměme si teď dvě částice se spinem $\frac{1}{2}$. Když je budeme popisovat odděleně, bude mít každá z částic svůj dvoudimenzionální prostor, označme je zde $V_2^{(1)}$ a $V_2^{(2)}$. V dalším textu používáme pro odlišení vektorových prostorů $V_2^{(1)}$ a $V_2^{(2)}$ červenou a modrou barvu, čímž se vyhneme indexům u vektorů. V každém z prostorů mohou zvolit bázi, pro jednoduchost zvolíme v obou prostorech bázi kanonickou.⁸

$$\begin{array}{ll} V_2^{(1)} : & |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ & |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array} \quad \begin{array}{ll} V_2^{(2)} : & |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ & |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

Nyní bychom rádi spojili oba prostory $V_2^{(1)}$ a $V_2^{(2)}$ do jediného, který by nám umožnil popisovat obě částice společně, označíme ho W_4 . Víme, že prostor W_4 musí být čtyřdimenzionální, protože obě částice dohromady mají čtyři možnosti, jak se průměty jejich spinu mohou nakombinovat. Získáme ho pomocí tzv. *tenzorového (direktního) součinu* prostorů $V_2^{(1)}$ a $V_2^{(2)}$, který se zapisuje jako

$$W_4 = V_2^{(1)} \otimes V_2^{(2)}.$$

Tenzorový součin definujeme jako zobrazení $\otimes : V_2^{(1)} \times V_2^{(2)} \rightarrow W_4$, které dvěma vektorům $\vec{v}_1 \in V_2^{(1)}$, $\vec{v}_2 \in V_2^{(2)}$ přiřadí vektor $\vec{w} \in W_4$ následujícím způsobem:

$$\vec{v}_1 \otimes \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{pmatrix} = \vec{w}. \quad (8.17)$$

⁸Ve shodě s kapitolou 6 jsme jako bázi použili vlastní vektory operátoru \hat{S}_z .

Tenzorový součin matic pak vypadá takto:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes A = \begin{pmatrix} aA & bA \\ cA & dA \end{pmatrix}, \quad (8.18)$$

kde A je matice 2×2 , pro přehlednost ji nerozepisujeme do složek.

Na prostoru W_4 potřebujeme definovat operátory průmětu celkového spinu, které by mohly působit na nové čtyřdimenzionální vektory. Víme, že průmět spinu systému do dané osy je roven součtu průmětů spinů obou částic do dané osy, nabízí se tedy napsat operátor celkového průmětu spinu jako⁹

$$\hat{S}_z = \hat{S}_z^{(1)} + \hat{S}_z^{(2)}. \quad (8.19)$$

Jenže tím bychom získali operátor jako matici 2×2 , tj. takový, který působí jen na dvou-dimenzionální vektory, ale my očekáváme, že spin dvou částic bude popsán čtyřdimenzi-onálním vektorem, a navíc sčítáme dva operátory působící každý v jiném prostoru, což není korektní.¹⁰ Pro konstrukci operátoru využijeme tenzorový součin. Průmět spinu první částice v dvoučásticovém systému bude reprezentovat operátor $\hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)}$, kde operátor $\hat{S}_z^{(1)}$ působí na vlnovou funkci první částice a působení na vlnovou funkci druhé částice, která průmět spinu první částice nijak neovlivňuje, zajistí jednotkový operátor z prostoru $V^{(2)}$. Průmět spinu druhé částice bude analogicky reprezentovat operátor $\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{S}_z^{(2)}$, kde operátor $\hat{S}_z^{(2)}$ působí na vlnovou funkci druhé částice a s vlnovou funkcí první částice se nic neděje, tedy na ni působí jednotkový operátor, tentokrát¹¹ z prostoru $V^{(1)}$. Pro celkový průmět spinu dostáváme

$$\hat{S}_z = \hat{S}_z^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{S}_z^{(2)}. \quad (8.20)$$

Úkol 8.5 Spočtěte operátory průmětu celkového spinu systému dvou částic se spinem $\frac{1}{2}$. Pomocí nich pak odvodte operátor velikosti spinu. *Nápověda:* Použijte vztahy (8.18) a (8.20).

Úkol 8.6 Spočtěte vlastní vektory a vlastní čísla operátorů \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z a \hat{S}^2 .

Nápověda: Pro usnadnění výpočtů stačí hledat vlastní čísla matic bez číselného faktoru

⁹Průmět spinu je skalární veličina, a proto celkový průmět získáme prostým součtem hodnot pro jednotlivé částice. Spin celkově je vektorová veličina a ten se již skládá komplikovaněji.

¹⁰Lépe by to bylo vidět, pokud by každá z částic měla jiný spin (např. $1/2$ a 1) a tím pádem byly matice obou operátorů různě velké. Pak by bylo jasně patrné, že je nemůžeme jen tak sečíst.

¹¹Důsledné rozlišování jednotkových operátorů má svůj význam, i když zde mají oba stejný tvar. Obecně lze zkonstruovat tenzorový součin navzájem různých prostorů (prostorů, které nejsou navzájem izomorfní), jednotkové operátory by pak vypadaly různě.

$\frac{\hbar}{2}$, resp. \hbar , resp. \hbar^2 a pak získaná vlastní čísla tímto číselným faktorem vynásobit.

Tento poznatek využijeme na dalších stránkách při skládání prostorové a spinové vlnové funkce.

8.3.2 Soustava dvou nerozlišitelných částic se spinem 1/2

Budeme-li chtít napsat celkovou vlnovou funkci pro dvě nerozlišitelné částice, musí být totálně symetrická, nebo totálně antisymetrická. To znamená, že prostorová část $\Psi^{(\text{prostor})}$ i spinová část $\chi^{(\text{spin})}$ musí být symetrická (index S) nebo antisymetrická (index A), a mohou nastat následující čtyři možnosti:

$$\Psi_S^{(\text{celková})} = \begin{cases} \Psi_S \chi_S \\ \Psi_A \chi_A \end{cases}$$

$$\Psi_A^{(\text{celková})} = \begin{cases} \Psi_S \chi_A \\ \Psi_A \chi_S \end{cases}$$

Úkol 8.7 Ukažte, že výše uvedené spinorové vlnové funkce $\Psi_S^{(\text{celková})}$ a $\Psi_A^{(\text{celková})}$ jsou opravdu symetrické, nebo antisymetrické. A také, že žádné jiné již neexistují.

Prostorovou vlnovou funkci budeme uvažovat ve tvaru, který už jsme použili v (8.11) a (8.12):

$$\Psi_S^{(\text{prostor})} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_A(\vec{r}_1)\psi_B(\vec{r}_2) + \psi_A(\vec{r}_2)\psi_B(\vec{r}_1)]$$

$$\Psi_A^{(\text{prostor})} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_A(\vec{r}_1)\psi_B(\vec{r}_2) - \psi_A(\vec{r}_2)\psi_B(\vec{r}_1)] ,$$

kde uvažujeme dvě možné prostorové části jednočásticové vlnové funkce, ψ_A a ψ_B .

Každá z částic má dvě možné hodnoty průmětu spinu do osy z , a to $\pm\frac{\hbar}{2}$. Pracovně je můžeme označovat jako „spin nahoru“ (\uparrow) pro $\frac{\hbar}{2}$ a „spin dolů“ (\downarrow) pro $-\frac{\hbar}{2}$, i když samozřejmě spin není žádná šipečka, která by mířila nahoru nebo dolů, jde pouze o grafické odlišení těchto dvou stavů.

Toto je tedy báze, ve které jsou ostře definované průměty spinu do osy z pro každou částici zvlášť:

$$|\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle.$$

Vidíme, že první a poslední funkce jsou symetrické, po prohození částic dostaneme tu-
též funkci. Zbylé dvě funkce nevyhovují požadavku nerozlišitelnosti (8.14), protože nejsou
symetrické ani antisymetrické. Vezmeme tedy jejich lineární kombinace $|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle$ a
 $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$, stejně jako jsme to udělali v úkolu 4 s funkcemi (8.11) a (8.12). Dostaneme
tedy čtyři možnosti, jak může spinová část vlnové funkce vypadat:

$$\chi_S = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad \text{triplet}$$

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \quad \text{singlet.}$$

Trojice symetrických vlnových funkcí bývá označována za *triplet*¹³. Jediné antisymetrické
vlnové funkci se říká *singlet*.¹⁴

Už víme, jak vypadá prostorová i spinová část vlnové funkce, aby splňovala požadavek
nerozlišitelnosti, pojďme tedy naše poznatky spojit. Částice se spinem 1/2 jsou fermiony
s antisymetrickou vlnovou funkcí. Výsledná vlnová funkce tedy může mít následující dva
tvary

$$\text{fermiony} \quad \Psi_A = \begin{cases} \Psi_S \chi_A & = \Psi_S \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \\ \Psi_A \chi_S & = \begin{cases} \Psi_A |\uparrow\uparrow\rangle \\ \Psi_A |\downarrow\downarrow\rangle \\ \Psi_A \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \end{cases} \end{cases}$$

¹³S těmito pojmy se ještě setkáme u chemické vazby v kapitole 9.

¹⁴K rozdělení na triplet a singlet jsme došli na základě toho, že šlo o částice se spinem $\frac{1}{2}$. Kdyby se jednalo
například o částice se spinem 1, dopadlo by rozdělení na singlet, triplet a quintuplet, obecně pak na
multiplety.

Řešení úkolů z podkapitoly 8

Řešení 8.1 Hélium se skládá z jádra a dvou elektronů. Hamiltonián pro oba elektrony tedy bude obsahovat jejich kinetické energie², dále musí zahrnovat elektrostatickou potenciální energii obou elektronů vůči jádru a posledním příspěvkem bude vzájemné elektrostatické působení elektronů.

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e}}_{\text{kinetická energie elektronů}} + \underbrace{V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2)}_{\text{potenciální energie elektronů vůči jádru}} + \underbrace{V(\vec{r}_{12})}_{\text{potenciální energie elektronů vůči sobě}}$$

Když ještě rozepíšeme tvar potenciální energie, dostaneme

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|},$$

kde Z je protonové číslo (v případě atomu hélia je $Z = 2$), e označuje elementární náboj a m_e hmotnost elektronu.

Řešení 8.2 Celková energie systému neinteragujících je dána součtem energií jednotlivých částic, tedy

$$E = E_1 + E_2.$$

V našem případě mohou částice zaujímat stavy s energiemi ε , 3ε , nebo 4ε . Sestavme si tedy tabulku, kde do záhlaví sloupců píšeme číslo energetické hladiny první částice (n_1) a do záhlaví řádků číslo energetické hladiny druhé částice (n_2). Do políček tabulky pak píšeme součet energií příslušných hladin obou částic.

E	$E_1 = \varepsilon$	$E_2 = 3\varepsilon$	$E_3 = 4\varepsilon$
$E_1 = \varepsilon$	2ε	4ε	5ε
$E_2 = 3\varepsilon$	4ε	6ε	7ε
$E_3 = 4\varepsilon$	5ε	7ε	8ε

Můžeme si povšimnout, že je tabulka symetrická podle hlavní diagonály, protože dvojicím stavů (n_1, n_2) a (n_2, n_1) přísluší stejné energie. V tomto případě jsou hladiny s energiemi 4ε , 5ε a 7ε dvakrát degenerované, schéma energetických hladin znázorňuje obrázek 8.1 vpravo.

²Hamiltonián celého atomu hélia by měl také člen pro kinetickou energii jádra, ale zůstaňme u představy, že je jádro nehybné kladně nabitě silové centrum, pak ho můžeme do našeho systému nezahrnout a tyto členy vynechat.

Řešení 8.3 Použijeme jednočásticové vlnové funkce popisující první a druhý energetický stav částice v nekonečné potenciálové jámě

$$\begin{aligned}\psi_A(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) && \text{základní stav,} \\ \psi_B(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) && \text{1. excitovaný stav.}\end{aligned}$$

Dvoučásticové vlnové funkce uvedené v zadání mají následující dva tvary:

$$\begin{aligned}\Psi_1(x_1, x_2) &= \psi_A(x_1)\psi_B(x_2) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right), \\ \Psi_2(x_1, x_2) &= \psi_A(x_2)\psi_B(x_1) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right),\end{aligned}$$

kteří se liší jenom záměnou obou částic – matematicky se to projeví prohozením souřadnic. Máme zjistit, zda tyto dvě funkce popisují totožný stav, tj. zda dávají stejnou hustotu pravděpodobnosti nalezení částice, viz rovnice (8.10). Pokud ano, museli bychom to dokázat obecně. Pokud ne, stačilo by najít jednu dvojici (x_1, x_2) , pro kterou tato podmínka neplatí, a věděli bychom, že naše funkce podmínce (8.10) obecně nevyhovují. Zvolme souřadnice $x_1 = \frac{L}{2}$ a $x_2 = \frac{L}{4}$ a podívejme se, jestli je pro ně tato podmínka splněna.

$$\begin{aligned}|\Psi_1(x_1, x_2)|^2 &= |\psi_A(x_1)\psi_B(x_2)|^2 = \left|\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 = 1, \\ |\Psi_2(x_1, x_2)|^2 &= |\psi_A(x_2)\psi_B(x_1)|^2 = \left|\sin\left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot \sin(\pi)\right|^2 = 0.\end{aligned}$$

Z toho plyne, že

$$|\psi_A(x_1)\psi_B(x_2)|^2 \neq |\psi_A(x_2)\psi_B(x_1)|^2,$$

to znamená, že vlnové funkce $\Psi_1(x_1, x_2)$ ani $\Psi_2(x_1, x_2)$ nepopisují přípustné stavy dvou nerozlišitelných částic, protože nezohledňují jejich záměnnost.

Abychom dostali vlnovou funkci, která bude popisovat identické částice, musíme vzít v úvahu obě možnosti, které částice mohou zaujmout, tedy vezmeme lineární kombinaci obou uvedených vlnových funkcí. Nejjednodušší možné lineární kombinace, ve kterých budou obě možnosti zastoupeny rovnocenně, je obě funkce vzít a sečíst je, nebo je odečíst, tj.

$$\Psi_s(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_A(x_1)\psi_B(x_2) + \psi_A(x_2)\psi_B(x_1)], \quad (8.11)$$

$$\Psi_a(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_A(x_1)\psi_B(x_2) - \psi_A(x_2)\psi_B(x_1)]. \quad (8.12)$$

Výpočtem se můžeme přesvědčit, že takto sestavené vlnové funkce už náš požadavek nerozlišitelnosti částic splňují.

Řešení 8.4

$$\begin{aligned}
|\Psi_s(x_1, x_2)|^2 &= \frac{1}{2} \psi_A^2(x_1) \psi_B^2(x_2) + \psi_A(x_1) \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) \psi_B(x_2) + \frac{1}{2} \psi_A^2(x_2) \psi_B^2(x_1) \\
&= |\Psi_s(x_2, x_1)|^2 \\
|\Psi_a(x_1, x_2)|^2 &= \frac{1}{2} \psi_A^2(x_1) \psi_B^2(x_2) - \psi_A(x_1) \psi_A(x_2) \psi_B(x_1) \psi_B(x_2) + \frac{1}{2} \psi_A^2(x_2) \psi_B^2(x_1) \\
&= |\Psi_a(x_2, x_1)|^2
\end{aligned}$$

Můžeme si všimnout, že prohození částic u první funkce $\Psi_s(x_1, x_2)$ ji nijak nezmění, zatímco u druhé funkce $\Psi_a(x_1, x_2)$ se tímto prohozením změní znaménko. Odtud je zvykem první z funkcí nazývat *symetrickou vlnovou funkcí*, druhou pak *antisymetrickou vlnovou funkcí*.

Řešení 8.5 Pro větší přehlednost nyní nepíšeme horní indexy označující prostor, na kterém operátor působí, ponecháváme pouze barevné rozlišení.

$$\begin{aligned}
\hat{S}_z &= \hat{S}_z \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{array} \right) + \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{array} \right) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Pro operátory \hat{S}_x a \hat{S}_y bude výpočet podobný:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_x &= \hat{S}_x \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right) + \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{S}_y &= \hat{S}_y \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ \hline i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{array} \right) + \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{array} \right) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Operátor velikosti momentu hybnosti spočteme podle vztahu

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

jako

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} + \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} + \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \\ &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Řešení 8.6 Matice operátoru \hat{S}_z je diagonální, vlastní čísla tedy vidíme rovnou na diagonále, jsou to \hbar , $-\hbar$, 0 a 0 . Pro matice operátorů \hat{S}_x a \hat{S}_y výpočet dopadne stejně, podle očekávání mají tedy všechny tři matice stejné spektrum. Pro matici operátoru kvadrátu velikosti spinu \hat{S}^2 dostaneme vlastní čísla $2\hbar^2$, $2\hbar^2$, $2\hbar^2$ a 0 .

Dávají tyto hodnoty smysl? Operátory průmětu spinu pro jednu částici mají vlastní čísla $\pm\frac{\hbar}{2}$. Pokud budeme měřit průměty spinu do nějaké osy obou částic najednou, pak můžeme dostat výsledky, které jsou kombinacemi průmětů, které by měla každá částice zvlášť. Pokud tedy budou mít obě průmět spinu $\frac{\hbar}{2}$, bude výsledný průmět \hbar . Pokud budou mít částice navzájem opačný průmět spinu, pak bude výsledný průmět nulový a jsou dvě možnosti, jak to může nastat. Pokud by měly obě částice průmět záporný, pak by výsledný průmět byl $-\hbar$.

Rozepišme nyní vlastní systémy všech čtyř operátorů.

$$\hat{S}_z : \quad \begin{array}{cccc} \lambda = \hbar & \lambda = 0 & \lambda = 0 & \lambda = -\hbar, \\ |\uparrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |\uparrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{array}$$

Vlastní vektory operátoru $\hat{S}_z^{(1,2)}$ lze také získat přímo direktním součinem vlastních vektorů

operátorů $\hat{S}_z^{(1)}$, $\hat{S}_z^{(2)}$ pro jednu částici jako

$$\begin{aligned}
 |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
 |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Stejný výpočet můžeme provést i pro vlastní vektory zbylých operátorů a zkontrolovat si tak naše výpočty.

$$\hat{S}_x : \quad \begin{array}{cccc}
 \lambda = \hbar & \lambda = 0 & \lambda = 0 & \lambda = -\hbar \\
 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{array}$$

$$\begin{aligned}
|\uparrow\rangle_x \otimes |\uparrow\rangle_x &= |\uparrow\uparrow\rangle_x & \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\
|\uparrow\rangle_x \otimes |\downarrow\rangle_x &= |\uparrow\downarrow\rangle_x & \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\
|\downarrow\rangle_x \otimes |\uparrow\rangle_x &= |\downarrow\uparrow\rangle_x & \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\
|\downarrow\rangle_x \otimes |\downarrow\rangle_x &= |\downarrow\downarrow\rangle_x & \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Označení $|\ \rangle_x$ a $|\ \rangle_y$ budeme používat pro odlišení vlastních vektorů jednotlivých operátorů pouze na tomto místě, jinde v textu se již nevyskytuje. Proto bude-li se jednat o vektor $|\ \rangle$ bez indexu, rozumíme tím automaticky vlastní vektor operátoru \hat{S}_z . Vektory odpovídající vlastním číslům \hbar a $-\hbar$ vyšly pomocí direktního součinu stejně jako přímým výpočtem. Vlastní vektory odpovídající vlastnímu číslu nula vyšly jinak, ale tyto vlastní vektory tvoří „vlastní rovinu,“ můžeme tedy za vlastní vektory odpovídající vlastnímu číslu nula zvolit jejich libovolnou lineární kombinaci.¹² Vidíme, že pokud vezmeme jejich součet a rozdíl, dostaneme tytéž vektory (resp. jejich násobek), jako jsme dostali přímým výpočtem.

$$\hat{S}_y : \begin{array}{cccc}
\lambda = \hbar & \lambda = 0 & \lambda = 0 & \lambda = -\hbar \\
\begin{pmatrix} 1 \\ i \\ i \\ -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -1 \\ i \\ i \\ 1 \end{pmatrix}
\end{array}.$$

$$\begin{aligned}
|\uparrow\rangle_y \otimes |\uparrow\rangle_y &= |\uparrow\uparrow\rangle_y & \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ i \\ -1 \end{pmatrix}, \\
|\uparrow\rangle_y \otimes |\downarrow\rangle_y &= |\uparrow\downarrow\rangle_y & \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ i \\ 1 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

¹²Tato vlastnost platí právě jen díky tomu, že tyto vektory odpovídají stejnému vlastnímu číslu.

$$\begin{aligned}
|\downarrow\rangle_y \otimes |\uparrow\rangle_y &= |\downarrow\uparrow\rangle_y & \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}, \\
|\downarrow\rangle_y \otimes |\downarrow\rangle_y &= |\downarrow\downarrow\rangle_y & \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ -i \\ -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

I zde opět součtem a rozdílem vektorů odpovídajících vlastnímu číslu nula dostaneme násobek vlastních vektorů z přímého výpočtu. Jako vlastní vektory operátorů $(\hat{S}^2)^{(1)}$ a $(\hat{S}^2)^{(2)}$ můžeme použít vlastní vektory operátorů $\hat{S}_z^{(1)}$ a $\hat{S}_z^{(2)}$, protože víme, že spolu komutují. Vezmeme-li jejich správnou lineární kombinaci, opět dostaneme

$$\hat{S}^2 : \quad \begin{array}{cccc} \lambda = 2 & \lambda = 2 & \lambda = 2 & \lambda = 0 \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{array}$$

Víme, že operátory \hat{S}_x , \hat{S}_y a \hat{S}_z spolu nekomutují, a nemají tedy společný systém vlastních vektorů, což odpovídá našim výpočtům. Zkusme tedy najít společný systém vlastních vektorů operátorů \hat{S}_z a \hat{S}^2 , o nichž víme, že spolu komutují.

Vidíme, že vektory $|\uparrow\uparrow\rangle = (1, 0, 0, 0)$ a $|\downarrow\downarrow\rangle = (0, 0, 0, 1)$ jsou společné oběma operátorům. Zbývající dva vektory operátoru \hat{S}^2 pak získáme jako lineární kombinaci vektorů $|\uparrow\downarrow\rangle = (0, 1, 0, 0)$ a $|\downarrow\uparrow\rangle = (0, 0, 1, 0)$ následovně:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Společný vlastní systém operátorů \hat{S}_z a \hat{S}^2 tak můžeme zapsat jako

$$\begin{aligned}
|\uparrow\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |\downarrow\downarrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\
|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Řešení 8.7 Pokud je funkce symetrická, po prohození částic nezmění znaménko. Tedy ani součin dvou symetrických funkcí nezmění znaménko. Antisymetrická funkce při prohození částic znaménko změní. Pokud vynásobím dvě antisymetrické funkce, při prohození částic změní znaménko obě, a tato znaménka se navzájem vyruší, výsledná funkce bude symetrická. A analogicky pokud k symetrické přidám antisymetrickou, která znaménko mění, bude ho měnit i výsledná funkce, bude tedy antisymetrická.