

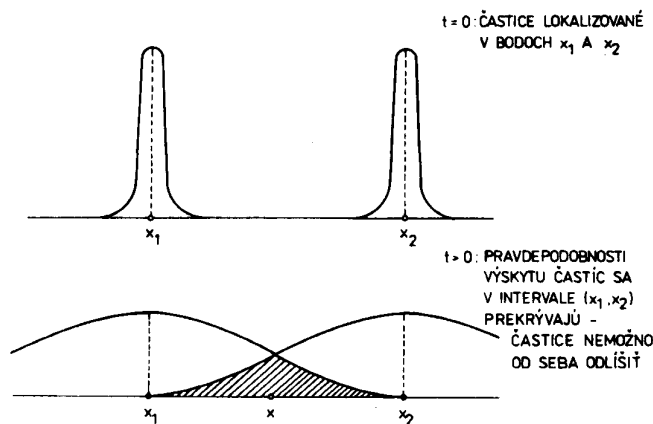
## 15 SÚSTAVY IDENTICKÝCH ČASTÍC

### 15.1 ÚVOD

Pri kvantomechanickom opise sústav, skladajúcich sa z viacerých „rovnakých“ častíc sa stretávame so zákonitosťami, ktoré nemajú klasický analóg.

V klasickej mechanike sa každá častica pohybuje po určitej dráhe (trajektórii) a tak aj častice, ktoré sú rovnaké (t.j. majú rovnaký spin, hmotnosť, náboj, magnetický moment, atď.) môžeme v princípe vždy rozlíšiť. Môžeme vždy povedať, že častica „1“ je tá, ktorá sa pohybovala po jednej určitej trajektórii, častica „2“ po druhej atď.

V kvantovej mechanike je situácia odlišná. Predstavme si dve častice, opísané v čase  $t = 0$  dvomi lokalizovanými a neprekrývajúcimi sa vlnovými balíkmi. Predpokladajme, že vzdialenosť centier balíkov je oveľa väčšia ako ich rozmery a častice teda môžeme rozlišovať. Vlnové balíky sa s rastúcim časom rozplývajú a v istom čase  $t > 0$  sa už budú prekrývať (pozri obr. 15.1). Ak v tomto čase nájdeme časticu v bode  $x$ , nemôžeme – z principiálnych dôvodov – povedať, či je to častica, ktorá bola pôvodne lokalizovaná v okolí bodu  $x_1$  alebo tá, ktorá bola v okolí bodu  $x_2$ . Táto nemožnosť rozlíšenia nie je vecou našich neúplných znalostí, ale vlastnosťou samotnej dvojčasticovej sústavy.



Obr. 15.1

Prirodzene vzniká otázka: odkiaľ vieme, že dva elektróny (alebo dva protóny) sú „rovnaké“ v zmysle principiálnej totožnosti. Odpoveď je jednak v tom, že všetky merania veličín ako náboj, hmotnosť, magnetický moment a pod., urobené na rôznych elektrónoch dali – v rámci chýb merania – vždy tú istú hodnotu, a jednak v tom, že všetky dôsledky predpokladu o totožnosti a principiálnej nerozlíšiteľnosti dvoch elektrónov, či dvoch protónov zatiaľ súhlasia s experimentom.

V tejto kapitole si ukážeme tri rôzne možné spôsoby opisu viacčasticových sústav.

Začneme s opisom pomocou vlnových funkcií. V tomto prístupe častice spočiatku číslujeme, ale potom sa obmedzujeme na tie vlnové funkcie, ktoré v istom zmysle nezávisia od očíslovania častíc.

Potom prejdeme k opisu, v ktorom stav sústavy charakterizujeme len údajom o tom, koľko častíc sa v danom jednočasticovom stave nachádza. Na tejto úrovni je nutné zaviesť operátor počtu častíc v danom stave a je nanajvýš prirodzené zaviesť aj operátory, ktoré kreujú, resp. anihilujú časticu v tomto stave. Potom môžeme zaviesť aj operátory  $\hat{\psi}(x)$  resp.  $\hat{\psi}^+(x)$  odpovedajúce anihilácii a kreácii častice v danom bode.

Napokon si ukážeme, že formalizmus pracujúci s kreačnými a anihilačnými operátormi a s operátormi  $\hat{\psi}(x)$ ,  $\hat{\psi}^+(x)$  dostaneme aj vtedy, ak Schrödingerovu rovnicu považujeme za rovnicu klasického poľa a formálne ju prekvantujeme.

## 15.2 VLNOVÁ FUNKCIA SÚSTAVY IDENTICKÝCH ČASTÍC

Najprv sformulujeme to, čo o vlnovej funkcii sústavy identických častíc hovoria tie zákonitosti kvantovej mechaniky, s ktorými sme sa už podrobnejšie zaoberali, a potom uvedieme Pauliho princíp, ktorý je novým – od predchádzajúcich nezávislým – postulátom. Pre jednoduchosť začneme so sústavou dvoch identických bezspinových častíc vo vonkajšom poli. Hamiltonián sústavy bude mať tvar

$$H = \frac{1}{2m} \hat{p}_1^2 + \frac{1}{2m} \hat{p}_2^2 + V(r_1) + V(r_2) + W(r_1, r_2) \quad (1)$$

kde  $W(r_1, r_2)$  je potenciálna energia interakcie oboch častíc a význam ostatných členov je zrejmý. Tento hamiltonián sa nezmení, ak obe častice vymeníme. Aby sme túto vlastnosť opísali formálne, zavedme operátor výmeny častíc 1 a 2 vzťahom

$$P_{12}f(r_1, r_2) = f(r_2, r_1) \quad (2)$$

kde  $f(r_1, r_2)$  je ľubovoľná funkcia dvoch premenných  $r_1, r_2$ . Všimnime si ďalej, že hamiltonián (1) je symetrický v indexoch „1“ a „2“. Preto je jedno, či na nejakú

funkciu najprv pôsobíme operátorom  $P_2$  a potom hamiltoniánom (1) alebo naopak, najprv týmto hamiltoniánom a potom operátorom  $P_{12}$ . Platí teda

$$P_{12}Hf(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = HP_{12}f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

Vzhľadom na to, že vzťah platí pre ľubovoľnú funkciu  $f$ , máme

$$P_{12}H = HP_{12} \quad (3a)$$

Z definičného vzťahu (2) možno ukázať, že operátor  $P_{12}$  je hermitovský:

$$P_{12} = P_{12}^+ \quad (3b)$$

Dve výmeny vykonané po sebe sú identitou

$$P_{12}P_{12} = 1 \quad (4)$$

a preto je operátor  $P_{12}$  aj unitárny. Po formálnej stránke je teda operátor  $P_{12}$  operátorom transformácie (výmeny častíc). Pretože podľa (3) komutuje s hamiltoniánom, je to operátor symetrie a zodpovedá nejakej zachovávajúcej sa veličine.

Zo vzťahu (4) vyplýva, že vlastné hodnoty operátora  $P_{12}$  sú len  $+1$  a  $-1$ . Vlastné funkcie príslušné k hodnote  $+1$  sú symetrické a k hodnote  $-1$  antisymetrické vzhľadom na zámenu  $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$ .

Doteraz sme nikde nevyužili fakt, že ide o totožné častice. (Hamiltonián (1) by mohol zodpovedať i dvom časticiam, na ktoré daný vonkajší potenciál pôsobí rovnako, avšak v poli iného potenciálu by sa častice mohli správať odlišne, a tým by boli rozlíšiteľné.) Ak ide o naozaj totožné častice, potom transformáciou  $P_{12}$  nedostaneme nový stav, ale iba pôvodný. Pretože však stavový vektor je určený až na fázu, stačí žiadať, aby platilo

$$P_{12}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\alpha}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (5)$$

Realistické stavy totožných častíc musia teda byť súčasne vlastnými stavmi operátora  $P_{12}$ . Podľa toho, čo sme povedali vyššie, to teda musia byť funkcie alebo symetrické, alebo antisymetrické. Pretože  $P_{12}$  je operátorom symetrie, príslušné vlastné hodnoty ( $+1$  resp.  $-1$ ) sa zachovávajú. Vlnová funkcia, na začiatku symetrická, ostane takou v priebehu celého časového vývoja. Podobne to platí aj o antisymetrickej vlnovej funkcii.

Predchádzajúca argumentácia sa dá zovšeobecniť aj na viacčasticové systavy. Vlnovú funkciu budeme označovať ako  $\Phi(1, 2, \dots, i, \dots, N)$ , kde čísla označujú súradnice, napr.  $i$  označuje  $\mathbf{r}_i$  a ak máme častice so spinom, bude  $i$  označovať súradnicu aj spinovú premennú  $i$ -tej častice. Operátor  $P_{ik}$  bude operátorom výmeny  $i$ -tej a  $k$ -tej častice. Podobne ako v predchádzajúcom by sme najprv ukázali, že  $P_{ik}$  komutuje s Hamiltonovým operátorom sústavy identických častíc, potom by sme ukázali, že  $P_{ik}P_{ik} = 1$  a prišli by sme k tomu, že vlastná funkcia  $H$  musí

spĺňať podmienku

$$P_{ik}\Phi(1, 2, \dots, N) = \eta_{ik}\Phi(1, 2, \dots, N)$$

kde  $\eta_{ik} = 1$  alebo  $\eta_{ik} = -1$ .

Pre nerozlíšiteľné častice je prirodzené žiadať, aby faktor  $\eta_{ik}$  bol rovnaký pre zámenu ľubovoľných dvoch častíc.<sup>237</sup> Tejto požiadavke vyhovujú iba dva typy vlnových funkcií a to buď funkcia úplne symetrická (pri nej  $\eta_{ik} = 1$ ), alebo funkcia úplne antisymetrická (vtedy  $\eta_{ik} = -1$ ).

Doterajšie úvahy však nehovoria nič o tom, či danú sústavu identických častíc treba opisovať symetrickou alebo antisymetrickou vlnovou funkciou, ani o tom, či náhodou tú istú sústavu netreba raz opisovať symetrickou a inokedy antisymetrickou vlnovou funkciou.

Analýza všetkých dostupných údajov ale hovorí jednoznačne, že:

**Sústavy identických bozónov (t. j. častíc s celočíselným spinom) sú opísané vždy symetrickými a sústavy identických fermiónov (t. j. častíc s poločíselným spinom) vždy antisymetrickými vlnovými funkciami.**

Toto tvrdenie – budeme ho nazývať zovšeobecneným Pauliho princípom – je novým a nezávislým postulátom nerelativistickej kvantovej mechaniky. Poznamenajme ešte, že „poločíselný“ znamená celé číslo plus jedna polovina, a že zovšeobecnený Pauliho princíp sa podarilo dokázať Paulimu zo všeobecných princípov lokálnej kvantovej teórie poľa.

Zatiaľ sa nenašiel ani jeden experimentálny fakt, ktorý by hovoril proti tomuto princípu. Naopak, vysvetlenie mnohých fyzikálnych javov, napr. stavby atómov a periodickej sústavy, supratekutosti „He a pod.,“ spočíva na tomto princípe.

### 15.3 SYMETRICKÉ A ANTISYMETRICKÉ VLNOVÉ FUNKCIE

Ak hľadáme riešenie napríklad bezčasovej SchR pre systém totožných častíc, mali by sme sa podľa diskusie v predchádzajúcej časti obmedziť iba na priestor symetrických alebo antisymetrických vlnových funkcií. Technicky je však často

---

<sup>237</sup> Vzhľadom na to, že  $P_{ik}P_{ik} = 1$  máme  $\eta_{ik} = +1$  alebo  $\eta_{ik} = -1$ . Mohli by sme sa preto domnievať, že pre  $N$  častíc existujú vlnové funkcie, ktoré sú voči výmene niektorých častíc presne symetrické a voči výmene iných presne antisymetrické. Takých funkcií ale niet. Problém vidno už z jednoduchého prípadu funkcie  $\Phi(x_1, x_2, x_3)$ , od ktorej žiadame, aby  $\Phi(a, b, c) = -\Phi(b, a, c)$ ,  $\Phi(a, b, c) = \Phi(c, b, a)$ ,  $\Phi(a, b, c) = \Phi(a, c, b)$ . Pre túto funkciu máme

$$\Phi(x_1, x_2, x_3) = -\Phi(x_2, x_1, x_3) = -\Phi(x_3, x_1, x_2) = -\Phi(x_3, x_2, x_1) = -\Phi(x_1, x_2, x_3)$$

a funkcia je identicky nulová. Hlbšie zdôvodnenie vidno z teórie reprezentácií grupy permutácií (pozri napríklad učebnicu kvantovej mechaniky Landaua a Lifšica, špeciálne časť o identických časticách, článok o Youngových schémach.)

výhodné hľadať riešenie bez tohto obmedzenia a až dodatočne ho symmetrizovať alebo antisymmetrizovať.

V tomto článku sa budeme zaoberať otázkou, ako sa konštruujú riešenia SchR s požadovanou symetriou. Začneme s dvočasticovou sústavou, kde je situácia jednoduchá. Hamiltonián  $H(1, 2)$  sa nemení pri zámene častíc. Ak  $\Phi(1, 2)$  je vlastnou funkciou  $H$  s energiou  $E$ , tak  $\Phi(2, 1)$  je ňou tiež. Symetrickú  $\Phi_S$  a antisymetrickú  $\Phi_A$  vlnovú funkciu dostaneme potom jednoducho

$$\Phi_S(1, 2) = A[\Phi(1, 2) + \Phi(2, 1)] \quad (1)$$

$$\Phi_A(1, 2) = B[\Phi(1, 2) - \Phi(2, 1)] \quad (2)$$

kde  $A, B$  sú normovacie konštanty. Ak pôvodné riešenie  $\Phi(1, 2)$  bolo už symetrické, potom  $\Phi_A = 0$  a podobne pre antisymetrické  $\Phi(1, 2)$  bude  $\Phi_S = 0$ . Tento postup symetrizácie a antisymetrizácie riešení SchR možno zovšeobecniť aj na prípad sústavy  $N$  identických častíc. Nech  $P_\nu$  je operátorom permutácie

$$(1, 2, \dots, N) \rightarrow (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N) \quad (3)$$

$$P_\nu \Phi(1, 2, \dots, N) = \Phi(\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N)$$

a nech  $\psi$  je riešením bezčasovej SchR pre  $N$ -časticovú sústavu. Pre identické častice sa  $H$  nemení pri permutácii častíc, t. j.

$$P_\nu H = H P_\nu \quad (4)$$

a preto  $P_\nu \Phi$  bude tiež riešením bezčasovej SchR príslušným k tej istej energii ako pôvodné  $\Phi$ . Symetrické riešenie SchR potom bude

$$\Phi_S = A \sum_{\nu} P_\nu \Phi(1, 2, \dots, N) \quad (5)$$

V elementárnej algebre sa ukazuje, že každú permutáciu možno zložiť z postupných zámien (transpozícií) dvoch prvkov. Danú permutáciu možno dostať viacerými kombináciami transpozícií, ale počet transpozícií  $n(\nu)$  bude vždy buď párný, buď vždy nepárny. Funkcia antisymetrická voči každej zámene dvoch častíc potom bude:

$$\Phi_A = B \sum_{\nu} [(-1)^{n(\nu)} P_\nu \Phi] \quad (6)$$

kde sčítujeme cez všetky permutácie a  $B$  je normovacia konštanta.

Predchádzajúca diskusia bola trochu akademická, pretože zväčša nepoznáme riešenie SchR pre Hamiltonov operátor sústavy  $N$ -častíc. Často ale poznáme približné riešenie získané istou, fyzikálne motivovanou aproximáciou. Zväčša táto aproximácia spočíva v nahradení problému jednoduchším. Napríklad pohyb

elektrónu v atóme je veľmi komplikovanou úlohou. Akonáhle však nahradíme pôvodnú úlohu približnou, v ktorej sa každý z elektrónov pohybuje v poli jadra a (ustredenom) poli ostatných elektrónov úloha sa dá riešiť. Podobne pri skúmaní elektrónov v kove sa často používa priblíženie, v ktorom sa každý elektrón pohybuje v poli jadier a v ustredenom poli ostatných elektrónov. Z matematickej stránky toto priblíženie znamená, že pôvodný komplikovaný hamiltonián obsahujúci interakcie častíc nahradíme súčtom jednočasticových hamiltoniánov

$$H(1, 2, \dots, N) = T(1) + U(1) + T(2) + U(2) + \dots + T(N) + U(N) = \Sigma H(i) \quad (7)$$

kde  $T(i)$  je operátor kinetickej energie  $i$ -tej častice a  $U(i)$  je jej potenciálna energia.

Riešenie bezčasovej SchR s hamiltoniánom (7) môžeme písať v separovanom tvare

$$\Phi(1, 2, \dots, N) = \varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2) \dots \varphi_{n_N}(N) \quad (8)$$

kde  $\varphi_{n_i}(i)$  – tzv. jednočasticové vlnové funkcie – spĺňajú SchR.

$$H(i)\varphi_{n_i}(i) = \varepsilon_{n_i}\varphi_{n_i}(i), \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

Kvôli jednoduchosti predpokladáme, že spektrum  $H(i)$  je diskrétné a  $n_i$  je súbor kvantových čísel určujúcich stav  $i$ -tej častice. Vlastná hodnota hamiltoniánu  $H$ , odpovedajúca riešeniu (8), potom je

$$E = \sum_1^N \varepsilon_{n_i}$$

Vlnová funkcia (8) vo všeobecnosti nemá požadované vlastnosti symetrie. Symetrické a antisymetrické vlnové funkcie nájdeme podľa (5) a (6). Pre dvojčasticovú sústavu takto dostaneme

$$\Phi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} [\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2) + \varphi_{n_1}(2)\varphi_{n_2}(1)] \quad n_1 \neq n_2 \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Phi_A(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2!}} [\varphi_{n_1}(1)\varphi_{n_2}(2) - \varphi_{n_1}(2)\varphi_{n_2}(1)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(1) & \varphi_{n_1}(2) \\ \varphi_{n_2}(1) & \varphi_{n_2}(2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (11)$$

kde ostatný výraz označuje determinant. Obidve funkcie  $\Phi_S$ ,  $\Phi_A$  sú normované na jednotku, ak pôvodné jednočasticové funkcie  $\varphi_{n_i}(i)$ , sú tiež takto normované a ak  $\varphi_{n_1}$  je ortogonálne na  $\varphi_{n_2}$ . Pre  $N$  nezávislých častíc takto dostaneme

$$\Phi_S(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \varphi_{n_1}(1) \varphi_{n_2}(2) \dots \varphi_{n_N}(N) \quad (12)$$

kde sčítajeme cez všetky permutácie Výraz (12) je užitočný, ak sú všetky  $n_i$  navzájom rôzne Ak sú medzi nimi rovnaké, je užitočné písať

$$\Phi_S(1, 2, \dots, N) = \left( \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P' \varphi_{n_1}(1) \varphi_{n_2}(2) \dots \varphi_{n_N}(N) \quad (13)$$

kde  $\Sigma'$  na pravej strane znamená, že započítavame iba tie permutácie indexov, ktoré vedú k rôznym vlnovým funkciám Takýchto permutácií je  $N!/(N_1! N_2! \dots)$ , kde  $N_1, N_2, \dots$  sú počty rovnakých indexov spomedzi  $n_1, n_2, \dots, n_N$ .

Antisymetrickú vlnovú funkciu zapíšeme v tvare Slaterovho determinantu

$$\Phi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{n_1}(1) & \varphi_{n_1}(2) & \dots & \varphi_{n_1}(N) \\ \varphi_{n_2}(1) & \varphi_{n_2}(2) & \dots & \varphi_{n_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{n_N}(1) & \varphi_{n_N}(2) & \dots & \varphi_{n_N}(N) \end{vmatrix} \quad (14)$$

Ak sú v (14) dve vlnové funkcie rovnaké, napr.  $n_1 = n_2$ , tak bude mať Slaterov determinant dva riadky rovnaké a  $\Phi_A$  sa bude identicky rovnať nule. Odtiaľ vyplýva nasledujúce tvrdenie:

V prírode sa nemôžu vyskytnúť systavy, v ktorých by sa dva totožné fermióny nachádzali v rovnakom kvantovom stave

Pri štúdiu štruktúry atómov sa najčastejšie vychádza v nultom priblížení zo stavu, v ktorom sa každý elektrón pohybuje v istom efektívnom, centrálne symetrickom poli. Stav elektrónu je potom určený štyrmi kvantovými číslami hlavným  $n$ , orbitálnym  $l$ , magnetickým  $m$  a spinovým  $s_z$ . Z predchádzajúcej formulácie potom prichádzame k Paulino vylučovaciemu princípu:

Sústava elektrónov v atóme sa nemôže nachádzať v stave, v ktorom by dva elektróny mali rovnakú štvoricu kvantových čísel  $n, l, m, s_z$ .

Táto formulácia pochádza od W Pauliho (1924). Predchádzajúce práce, naznačujúce existenciu vylučovacieho princípu, napísal N. Bohr.

## 15.4 VLNOVÁ FUNKCIA DVOCH ELEKTRÓNOV. KLASIFIKÁCIA HLADÍN V ATÓME He. VÝMENNÁ INTERAKCIA

Ako jednoduchú ilustráciu predchádzajúceho formalizmu si v tomto článku bližšie všimnime vlnovú funkciu dvoch elektrónov v konkrétnom prípade atómu

He. Ak zanedbáme spinovo-orbitálnu a spinovo-spinovú interakciu, bude hamiltonián závisieť od priestorových súradníc oboch elektrónov  $H = H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Operátor celkového spinu  $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$  potom komutuje s hamiltoniánom a spinovú časť vlnovej funkcie môžeme vybrať ako vlastnú vlnovú funkciu dvojice komutujúcich operátorov

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2, \quad S_z = s_{1z} + s_{2z} \quad (1)$$

S touto otázkou sme sa už zaoberali v kapitole o momente hybnosti a vlnové funkcie môžeme priamo napísať

$$\chi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{+}(1)\chi_{-}(2) - \chi_{-}(1)\chi_{+}(2)] \quad (2)$$

$$\chi_1^1 = \chi_{+}(1)\chi_{+}(2) \quad (3a)$$

$$\chi_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{+}(1)\chi_{-}(2) + \chi_{+}(2)\chi_{-}(1)] \quad (3b)$$

$$\chi_{-1}^1 = \chi_{-}(1)\chi_{-}(2) \quad (3c)$$

Označenie je štandardné,  $\chi_{s_z}^s$  označuje spinovú vlnovú funkciu s celkovým spinom  $S$  a s priemetom  $S_z$  na os  $z$ . Jednočasticové spinové funkcie  $\chi_{+}(i)$ ,  $\chi_{-}(i)$  odpovedajú stavom, v ktorých spin  $i$ -tého elektrónu má priemet spinu  $+1/2$ , resp.  $-1/2$  (v jednotkách  $\hbar$ ) na os  $z$ .

Spinovú vlnovú funkciu (2) nazývame singletom a funkcie (3) tripletom. Názov pochádza z toho, že vo vonkajšom magnetickom poli sa hladina s celkovým spinom 1 štiepi na tri podhladiny líšiace sa priemetom spinu na smer magnetického poľa.

Pretože celková vlnová funkcia dvojelektrónovej sústavy musí byť antisymetrická, vlnové funkcie môžu mať jeden z nasledujúcich tvarov

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_0^0 \quad (4)$$

$$\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_1^1 \quad \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_0^1 \quad \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{-1}^1 \quad (5)$$

kde  $\Phi_S$  a  $\Phi_A$  označuje symetrickú a antisymetrickú funkciu priestorových súradníc  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ .

V atóme hélia sa okolo jadra s nábojom  $2e$  pohybujú dva elektróny. Hamiltonián sústavy (v uvedenom priblížení) je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (6)$$

kde  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ . Priestorová časť vlnovej funkcie spĺňa rovnicu

$$H\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (7)$$



pričom  $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  je symetrická pre singletný a antisymetrická pre tripletný stav. Rovnica (7) s hamiltoniánom (6) sa nedá riešiť exaktne. Ťažkosti spôsobuje člen  $e^2/r_{12}$ , ktorý závisí od súradníc oboch elektrónov a znemožňuje separáciu premenných. Tvar  $H$  priamo navádza na použitie poruchovej metódy s poruchou

$$H' = \frac{e'^2}{r_{12}} \quad (8)$$

Tento člen však v skutočnosti nie je malý v porovnaní s energiou elektrónov v poli jadra. Napriek tomu použitie poruchovej metódy poskytuje základnú informáciu o štruktúre energetických hladín atómu He (a hélia podobných iónov  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Be}^{++}$ ). Presnejšie výsledky sa dostávajú pomocou variačnej metódy.

Vlnová funkcia  $\Phi$  v nultom priblížení poruchovej metódy bude teda riešením rovnice

$$H_0\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_0\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (9)$$

kde  $H_0$  je dané pravou stranou (6) bez posledného člena. Riešenie už teraz môžeme hľadať v separovanom tvare

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2) \quad (10)$$

Po separácii premenných v (9) dostaneme pre  $\varphi_1$  a  $\varphi_2$  SchR, ktoré sú úplne rovnaké ako SchR atómu vodíka, iba náboj jadra je  $2e$  namiesto  $e$ . Každá z funkcií  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  je teda riešením vodíku podobného atómu a je daná jednoznačne tromi kvantovými číslami: hlavným, orbitálnym a magnetickým. Platí:

$$\varphi_1(\mathbf{r}_1) = \varphi_n(\mathbf{r}_1) \quad \varphi_2(\mathbf{r}_2) = \varphi_m(\mathbf{r}_2) \quad (11)$$

kde symboly  $n$ ,  $m$  zastupujú spomínané trojice kvantových čísel. Pre energiu  $E_0$  platí

$$E_0 = E_n + E_m \quad (12)$$

kde  $E_n$ ,  $E_m$  sú energie prislúchajúce vlnovým funkciám  $\varphi_n$ ,  $\varphi_m$ . Symetrické a antisymetrické riešenia SchR (9) potom budú

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_n(\mathbf{r}_1)\varphi_m(\mathbf{r}_2) + \varphi_n(\mathbf{r}_2)\varphi_m(\mathbf{r}_1)] \quad n \neq m$$

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_n(\mathbf{r}_1)\varphi_m(\mathbf{r}_2) \quad \text{pre } n = m \quad (13)$$

$$\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_n(\mathbf{r}_1)\varphi_m(\mathbf{r}_2) - \varphi_n(\mathbf{r}_2)\varphi_m(\mathbf{r}_1)] \quad (14)$$

Pre  $n = m$  je  $\Phi_A \equiv 0$ . Ak zanedbáme poruchu  $H'$ , majú singletné aj tripletné riešenia (13) a (14) rovnakú energiu danú vzťahom (12). Zapnutie poruchy  $H'$  sníma degeneráciu medzi tripletnými a singletnými stavmi. Korekcie k energii

v singletnom a tripletnom stave označíme po rade ako  $\Delta E_S$ ,  $\Delta E_A$ . Podľa bežných pravidiel poruchovej metódy ich nájdeme zo vzťahov

$$\Delta E_S = \int \Phi_S^* H' \Phi_S d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (15)$$

$$\Delta E_A = \int \Phi_A^* H' \Phi_A d^3 r_1 d^3 r_2$$

Použitie týchto vzťahov pre degenerovaný prípad je tu oprávnené, lebo porucha „nepremiešava“ singletné a tripletné stavy. Výraz  $\int \Phi_A^* H' \Phi_S d^3 r_1 d^3 r_2$  sa rovná nule, pretože podintegrálna funkcia je antisymetrická voči zámene  $r_1$  na  $r_2$ .

Ak do (15) dosadíme vyjadrenia (13), dostaneme (pri  $n + m$ )

$$\Delta E_S = B + A \quad (16)$$

$$\Delta E_A = B - A$$

kde

$$B = \int \varphi_n^*(r_1) \varphi_n(r_1) H' \varphi_m^*(r_2) \varphi_m(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (17)$$

$$A = \int \varphi_n^*(r_1) \varphi_m(r_1) H' \varphi_m^*(r_2) \varphi_n(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (18)$$

a pri úpravách sme využili to, že  $H'$  je reálnou symetrickou funkciou svojich argumentov.

Rovnica (16) platí iba pre  $n \neq m$ . Ak  $n = m$ , dostávame

$$\Delta E_S = B \quad n = m \quad (19)$$

Výraz  $B$  má jednoduchý fyzikálny význam,  $\varphi_n^*(r_1) \varphi_n(r_1) = \rho_n(r_1)$  je hustotou pravdepodobnosti pre výskyt častice 1 v okolí bodu  $r_1$ . Pre  $B$  potom dostávame

$$B = \int \rho_n(r_1) \frac{e'^2}{r_{12}} \rho_m(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (20)$$

čo je očakávaný výsledok: je to energia interakcie dvoch nábojov, rozložených v priestore s hustotami  $\rho_n(r_1)$  a  $\rho_m(r_2)$ . Príspevok  $A$  – nazývaný *výmenným integrálom* alebo *výmennou interakciou* – nemá klasický analóg a je typickým kvantovomechanickým efektom, vyplývajúcim zo špecifických vlastností sústavy identických častíc.

Podrobnejšie výpočty tu nebudeme robiť, uvedieme iba výsledky a urobíme stručný komentár. Energie jednotlivých stavov budeme udávať ako násobky tzv. atómovej jednotky

$$E_a = \frac{e'^2}{a} = \frac{me'^4}{\hbar^2} \approx 27,21 \text{ eV}$$

kde  $a$  je Bohrov polomer atómu vodíka.

Základný stav atómu He je ten, pri ktorom sú oba elektróny (v neporušenom stave) v stavoch  $1s$ . Takýto stav má nutne symetrickú priestorovú časť vlnovej

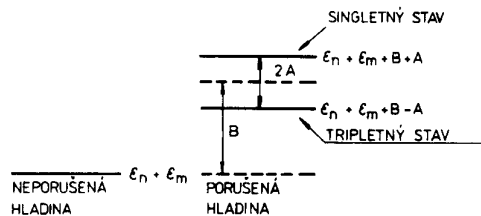
funkcie a je preto singletom Jeho energia aj s korekciou prvého rádu je

$$E[(1s)^2] = -\left(4 - \frac{5}{4}\right)$$

kde prvý člen na pravej strane odpovedá situácii bez poruchy, druhý je korekcia. V hranatej zátvorke sme naznačili prítomnosť dvoch elektrónov v stave  $1s$  Prvý excitovaný stav má jeden elektrón v stave  $1$  a druhý v stave  $2s$  V tejto situácii už môžeme mať tripletný a singletný stav Príslušné energie aj s korekciou prvého rádu sú

$$E\left[(1s)(2s), \begin{matrix} \text{singlet} \\ \text{triplet} \end{matrix}\right] = -\frac{5}{2} + \frac{34}{81} \pm \frac{32}{729}$$

kde prvý člen odpovedá situácii bez poruchy, druhý člen je elektrostatickou korekciou  $B$  a posledný predstavuje výmennú interakciu Vidíme, že tripletný stav má nižšiu energiu ako singlet Situácia je schematicky znázornená na obr 15.2.



Obr. 15.2

Poruchová metóda takto vedie k rozštiepeniu singletného a tripletného stavu Výmenný integrál<sup>238</sup>  $A$  uprednostňuje paralelné usporiadanie oboch spinov (t. j. celkový spin rovný jednej) pri zadaných ostatných kvantových číslach Treba zdôrazniť, že sme nikde nezavádzali interakciu medzi spinmi alebo magnetickými momentami elektrónov. Celý efekt vedúci k prednostne paralelnej orientácii spinov je dôsledkom spolupráce elektrostatickej interakcie a Pauliho princípu (antisymettnosti vlnovej funkcie)

Analogický mechanizmus je zodpovedný aj za prednostne paralelnú orientáciu spinov elektrónov v niektorých pevných látkach, vedúcu k feromagnetickým vlastnostiam Toto vysvetlenie feromagnetizmu pochádza od Heisenberga.

<sup>238</sup> Označenie výmennej interakcie symbolom  $A$  pochádza zo slova „Austausch“, z čias, keď nemčina bola hlavným svetovým jazykom vo fyzike. Výborne napísaná diskusia o výmennej energii nájde čitateľ vo Feynmanových prednáškach z fyziky.

Stavy atómu hélia sa teda rozpadajú do dvoch skupín. Jednu tvoria tripletné stavy s antisymetrickou priestorovou vlnovou funkciou (tzv. ortohélium), druhú singletné stavy so symetrickou priestorovou vlnovou funkciou (tzv. parahélium). Optické prechody medzi stavmi orto- a parahélia sú v dipólovom priblížení zakázané. Dipólový moment dvojelektrónovej sústavy  $\mathbf{d} = -e(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$  je symetrickou funkciou vzhľadom na zámenu  $\mathbf{r}_1$  a  $\mathbf{r}_2$ . Maticový element  $\mathbf{d}$  medzi stavmi  $\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  a  $\psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  bude potom identicky rovný nule. Prechody medzi orto- a parahéliom nie sú zakázané absolútne. Môžu ich spôsobiť napr. zrážky atómov alebo niektoré z interakcií, ktoré sme zanedbali. Pravdepodobnosť týchto prechodov je však malá.

## 15.5 OPIS $N$ -ČASTICOVÝCH STAVOV POMOCOU OBSADZOVACÍCH ČÍSEL. KREAČNÉ A ANIHILAČNÉ OPERÁTORY

Doteraz sme  $n$ -časticové stavy opisovali pomocou vlnových funkcií. Išlo vlastne o opis v rámci určitej (konkrétne súradnicovej) reprezentácie. Aj keď v princípe s týmto opisom môžeme vystačiť, obmedziť sa naň nemusí byť vždy účelné. Súradnicová reprezentácia navyše nezodpovedá celkom „duchu“ mnohočasticového problému. Súradnice „jednotlivých častíc“ sú totiž číslované ako keby častice boli rozlíšiteľné. Hoci toto číslovanie je iba formálne (vlnové funkcie sú symetrické alebo antisymetrické, preto zmena očíslovania nehrá úlohu) predsa sa javí ako umelý a neprirodzený prvok opisu fyzikálnej sústavy identických častíc.

V tomto článku zavedieme všeobecnejší opis mnohočasticových systémov – reprezentáciu pomocou tzv. Fokovho priestoru. V tomto prístupe sa vyššie spomínaný nedostatok nevyskytuje, preto sa reprezentácia Fokovým priestorom zdá prirodzenejšia, hoci, ako ukážeme, je ekvivalentná opisu pomocou symetrických resp. antisymetrických vlnových funkcií.

Ako vždy pri prechode k inej reprezentácii, treba zvoliť určitú bázu, t. j. úplný systém stavov. Ako uvidíme neskôr, stačí sa zaoberať najprv systémom  $N$  neinteragujúcich (voľných) častíc. Ukáže sa totiž, že úplný systém stavov, ktorý zvolíme ako bázu v tomto prípade, vyhovuje ako báza i vo všeobecnejšej situácii pre systém interagujúcich častíc.

Budeme najprv skúmať sústavu  $N$  neinteragujúcich bozónov, ktoré si predstavíme uzavreté v objeme  $V = L^3$  (napríklad v objeme tvaru kocky s hranou  $L$ ). Pretože ide o systém voľných častíc, stacionárne stavy celého systému možno skonštruovať jednoducho, ak budeme poznať tzv. jednočasticové stavy. Sú to stacionárne stavy, ktoré by mal rovnaký systém skladajúci sa z jedinej častice. Jednočasticové stavy dobre poznáme. Sú to harmonické rovinné vlny spĺňajúce

určité okrajové podmienky<sup>239</sup> čo sú vlastne podmienky kladené na ich vlnové vektory  $\mathbf{k}_i$ . Zložky  $k_{1i}, k_{2i}, k_{3i}$  každého z vektorov  $\mathbf{k}_i$  sú totiž celočíselnými násobkami veličiny  $2\pi/L$ . Pre príslušné vlnové funkcie budeme používať stručné označenie  $\psi_i(\mathbf{x})$ , namiesto úplného symbolu  $\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{x})$ , hoci príležitostne používame úplného symbolu nevyklúčujeme. Uvedieme si jednoduchý príklad. Napíšeme explicitne vlnovú funkciu trojčasticového stavu, v ktorom dve častice sa nachádzajú v (jednočasticovom) stave danom vektorom  $\mathbf{k}_1$  a jedna častica je v stave s vlnovým vektorom  $\mathbf{k}_2$ . Príslušná (symetrická) vlnová funkcia má zrejme tvar

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_3) + \psi_1(\mathbf{r}_3) \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1) + \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_3) \psi_2(\mathbf{r}_2) \}$$

V ďalšom sa často stretáme s vlnovými funkciami viacčasticových sústav, a aby sme sa vyhli nedorozumeniam, zavedieme už teraz označenia.

$\mathbf{k}_i$ , skrátene len $i$	označuje kvantové čísla stavu jedinej častice
$n_{\mathbf{k}_i}$ , skrátene len $n_i$	označuje počet častíc nachádzajúcich sa v stave $i$
$\alpha, \beta, \gamma, \dots$	číslujú jednotlivé častice, napríklad $\mathbf{x}_\alpha$ označuje polohový vektor $\alpha$ -tej častice atď.
$\psi_i(\mathbf{x}_\alpha)$	vlnová funkcia $\alpha$ -tej častice nachádzajúcej sa v stave $i$
$n_1 + n_2 + \dots = N$	súčet počtov častíc nachádzajúcich sa v jednotlivých stavoch je rovný celkovému počtu častíc
$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$	symetrizovaná vlnová funkcia $N$ -časticovej sústavy. V jednočasticovom stave $i$ je $n_i$ častíc.
$\mathbf{a}_{\mathbf{k}_i}$ , skrátene $\mathbf{a}_i$	anihilačný operátor – znižuje počet častíc v stave $i$ o jednotku
$\mathbf{a}_{\mathbf{k}_i}^+$ , skrátene $\mathbf{a}_i^+$	kreačný operátor – zvyšuje počet častíc v stave $i$ o jednotku

<sup>239</sup> Podrobnejšie pozri článok 2.2.

Vo všeobecnom prípade vlnovú funkciu stavu  $N$ -časticového systému, v ktorom sa  $n_1$  častíc nachádza v stave danom vektorom  $\mathbf{k}_1$ ,  $n_2$  častíc v stave danom  $\mathbf{k}_2$ , ... možno vyjadriť v tvare

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left( \frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P \psi_1(\mathbf{x}_\alpha) \dots \psi_2(\mathbf{x}_\beta) \dots \quad (1)$$

kde podobne ako v (3.13) sčítujeme len cez tie permutácie častíc, pri ktorých sa aspoň jedna častica dostane do iného jednočasticového stavu ako bola pred permutáciou. Celkový počet permutácií je  $N!$ , ale v  $n_1!$  prípadoch častica  $\alpha$  ostane v stave  $k_1$  atď., takže počet uvažovaných permutácií je  $N!/(n_1! n_2! \dots)$  a odtiaľ pochádza normovací faktor na pravej strane (1). Funkcia konštruovaná podľa (1) je normovaná na jednotku. Na pravej strane (1) sa totiž objavujú iba funkcie, ktoré sú navzájom ortogonálne.

Zápis vo vzťahu (1) nie je celkom výstižný, a preto sa pri ňom zastavíme ešte podrobnejšie. Jednočasticové stavy máme usporiadané a očíslované indexom  $i$ . Ak sú napríklad častice voľné, je každý stav  $i$  daný vlnovým vektorom  $\mathbf{k}_i$ , ktorého komponenty sú celočíselnými násobkami  $2\pi/L$ . Usporiadanie stavov možno urobiť napríklad takto: stav s  $i = 1$  bude mať  $\mathbf{k}_1 = (2\pi/L, 0, 0)$ , stav s  $i = 2$  bude mať  $\mathbf{k}_2 = (0, 2\pi/L, 0)$ , stav s  $i = 3$  nech má  $\mathbf{k}_3 = (0, 0, 2\pi/L)$ , stav s  $i = 4$  bude  $(4\pi/L, 0, 0)$  atď. V stave  $i$  nech je  $n_i$  častíc. Niektoré z  $n_i$  budú ale nulové. Z postupnosti  $(n_1, n_2, \dots)$  môžeme tieto nulové prvky vypustiť a zostaviť podpostupnosť  $(n_{i_1}, n_{i_2}, \dots)$ . Na pravej strane v (1) sa potom, prirodzene objavia len tie stavy, v ktorých je  $n_i$  nenulové a rovnica (1) by mala byť podrobne zapísaná takto

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left( \frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \cdot \sum_P \psi_{i_1}(x_{\alpha_1}) \dots \psi_{i_1}(x_{\alpha_{n_1}}) \psi_{i_2}(x_{\beta_1}) \dots \quad (1')$$

V situáciách keď budeme v ďalšom používať menej „oindexovaný“ zápis (1), treba pod ním chápať presnejší zápis (1').

Všimnime si však – a v tom spočíva základná myšlienka reprezentácie vo Fokovom priestore – že na to, aby sme vedeli napísať explicitný tvar vlnovej funkcie stačilo, že sme poznali charakteristiku stavu obsiahnutú napríklad vo výraze: „dve častice sa nachádzajú v stave  $\psi_1$  a jedna častica v stave  $\psi_2$ “.

Ak teda zadáme obsadzovacie čísla, t. j. počty častíc nachádzajúcich sa v jednotlivých jednočasticových stavoch, je tým stav sústavy úplne určený.

Po formálnej stránke je potom výhodné zaviesť operátory, pomocou ktorých možno z určitého stavu „vyrobiť“ stav s niektorým obsadzovacím číslom o jednotku vyšším ako mal pôvodný stav.

Ukazuje sa, že v prípade bozónov majú tieto „zvyšovacie“ operátory všetky vlastnosti kreačných operátorov, s ktorými sme sa stretli pri harmonickom oscilátore. Zopakujme si preto stručne, že stavy oscilátora sme značili ako  $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$  pričom ich môžeme postupne konštruovať pôsobením kreačného operátora  $a^+$  na základný stav  $|0\rangle$ :

$$|1\rangle = a^+|0\rangle$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} a^+ a^+ |0\rangle$$

⋮

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^+ |n-1\rangle$$

takže všeobecne

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

Ak ďalej zavedieme operátor  $N = a^+ a$ , máme  $N|n\rangle = n|n\rangle$ . Okrem operátora  $a^+$  používame aj operátor  $a$ , pričom platí

$$[a, a^+] = 1$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

Takto definované operátory  $a, a^+$  sú navzájom hermitovsky združené, ako to už naznačujú použité symboly. Platí tiež

$$\langle n'|a^+|n\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}, \quad \langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n} \delta_{n'-1, n}$$

Ukážeme si teraz, ako možno použiť analogický formalizmus pri opise N-bozónovej sústavy. Označme symbolom

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$$

stav, v ktorom je  $n_i$  častíc v stave s kvantovými číslami  $k_1, n_2$  častíc v stave s kvantovými číslami  $k_2$  atď. Zavedme ďalej – v analógii s lineárnym harmonickým oscilátorom operátory  $a_i, a_i^+$ , ktoré anihilujú resp. kreujú časticu v stave  $k_i$ .

Stav, v ktorom nemáme žiadnu časticu, budeme označovať ako  $|0, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$ . Stav, v ktorom máme jednu časticu v jednočasticovom stave s  $k_1$  bude  $|1, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$  a pomocou operátora  $a_i^+$  môžeme písať

$$|1, 0, \dots\rangle = a_1^+ |0, 0, \dots\rangle$$

Stav s dvoma časticami v tomto jednočasticovom stave bude

$$|2, 0, 0, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} a_1^\dagger a_1^\dagger |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$$

Pre operátory  $a_i, a_i^\dagger$  platia komutačné vzťahy<sup>240</sup>

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (2a)$$

$$[a_i, a_j] = 0 \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (2b)$$

Tieto komutačné vzťahy sú rovnaké ako pre systém nezávislých oscilátorov. Platí potom

$$a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$$

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$$

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} [a_1^\dagger]^{n_1} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} [a_2^\dagger]^{n_2} \dots \\ &\dots \frac{1}{\sqrt{n_i!}} [a_i^\dagger]^{n_i} \dots |0, 0, 0, \dots\rangle \end{aligned} \quad (3)$$

Zo stavov (3) možno, vytvorením všetkých možných konečných i nekonečných superpozícií, vybudovať Hilbertov priestor – tzv. Fokov priestor. Z hľadiska kvantovej mechaniky však stavom s rôznym celkovým počtom častíc  $N = \sum_i n_i$  zodpovedajú stavy rôznych mechanických sústav. Hovoriť o superpozíciách takýchto stavov v rámci kvantovej mechaniky nemá vlastne zmysel. Špeciálne stav  $|0, 0, 0, \dots\rangle$  sa v rámci kvantovej mechaniky nedá fyzikálne vôbec interpretovať – hovoriť v mechanickom zmysle o systéme bez častíc nemá zmysel. Celkový Fokov priestor má prirodzenú interpretáciu až v rámci kvantovej teórie poľa. My s ním budeme narábať iba ako s užitočným formálnym aparátom, v interpretačných otázkach sa nakoniec vždy obmedzíme len na príslušný podpriestor, zodpovedajúci danému fixnému počtu častíc.

Pomocou komutačných vzťahov (2) sa môžeme presvedčiť o tom, že stavy (3) tvoria ortonormovaný systém:

$$\langle n'_1, n'_2, \dots | n_1, n_2, \dots \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \quad (4)$$

<sup>240</sup> Ak index  $i$  zastupuje trojicu  $(k_1, k_2, k_3)$  a index  $j$  trojicu  $(q_1, q_2, q_3)$  interpretujeme symbol  $\delta_j$  ako  $\delta_{k_1 q_1} \delta_{k_2 q_2} \delta_{k_3 q_3}$ .



Sústava stavov (3) teda tvorí bázu Fokovho priestoru. Tento systém stavov je úplným systémom pre kvantovomechanický opis sústavy  $N$  bozónov i v prípade, že ide o interagujúce častice. Poznamenajme ešte, že operátor  $\mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i = \mathbf{N}_i$  má význam operátora počtu častíc v  $i$ -tom jednočasticovom stave, t. j. platí

$$\mathbf{N}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (5)$$

Budeme sa teraz zaoberať otázkou súvisu Fokovho priestoru s formalizmom vlnových funkcií. Ak je doterajší postup konzistentný, potom stavu (3) musí zodpovedať stavová vlnová funkcia (1). Po formálnej stránke ide o vzťah medzi rôznymi reprezentáciami, takže musí platiť

$$\psi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle \quad (6)$$

kde  $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$  označuje stav, v ktorom jedna častica sa nachádza v mieste  $\mathbf{x}_1$  jedna častica v mieste  $\mathbf{x}_2$  atď. Explicitnú konštrukciu tohto stavu uvedieme v článku 15.6. Čitateľ sa potom môže presvedčiť, že vzťahy (1) a (6) sú konzistentné. Nájdeť teraz vyjadrenie niektorých dôležitých operátorov vo Fokovom priestore. Začneme s tzv. jednočasticovými operátormi. Ako príklad uvedieme najprv hamiltonián voľných častíc. V jazyku vlnových funkcií je to

$$\mathbf{H} = \sum_{\rho=1}^N \mathbf{H}(\mathbf{x}_\rho) \quad \mathbf{H}(\mathbf{x}_\rho) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\rho \quad (7)$$

Pretože funkcie  $\psi_{k_i}(\mathbf{x}_\rho)$  sú vlastnými funkciami jednočasticového hamiltoniánu  $\mathbf{H}(\mathbf{x}_\rho)$ , príslušnými k vlastným hodnotám  $E_i = \hbar^2 \mathbf{k}_i^2 / 2m$ , dostaneme z (1)

$$\int \psi_{n'_1, n'_2, \dots}^* \mathbf{H} \psi_{n_1, n_2, \dots} = \left[ \sum_i E_i n_i \right] \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2, \dots}$$

Vo Fokovom priestore má rovnaké maticové elementy operátor

$$\mathbf{H} = \sum_i E_i \mathbf{N}_i = \sum_i E_i \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i \quad (8)$$

Výraz (8) je teda prekladom (7) do „jazyka“ Fokovho priestoru.

Uvažujme teraz všeobecný prípad tzv. jednočasticového operátora, ktorý vo formalizme vlnových funkcií má tvar

$$\mathbf{f} = \sum_\rho \mathbf{f}(\mathbf{x}_\rho) \quad (9)$$

Predstaviť si pod ním môžeme napríklad potenciálnu energiu častíc vo vonkajšom poli, potom  $\mathbf{f}(\mathbf{x}_\rho) = V(\mathbf{x}_\rho)$ . Zrátame jeho maticový element

$$\int \psi_{n'_1, n'_2, \dots}^* \mathbf{f} \psi_{n_1, n_2, \dots} dx_\alpha dx_\beta \quad (10)$$

a potom už ľahko nájdeme tvar operátora  $\mathbf{f}$  vo Fokovom priestore. Ak dosadíme (9) do (10) a využijeme (1), dostaneme výraz skladajúci sa z  $N$ -násobných

integrálov, každý z nich sa dá vyjadriť ako súčin  $N$  jednoduchých integrálov, z ktorých jeden má tvar:

$$\int \psi_j^*(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \equiv f(j, i)$$

a ostatné sú typu

$$\int \psi_s^*(\mathbf{x}) \psi_s(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{rs}$$

Je teda zrejmé, že v (10) dostaneme nenulové príspevky iba vtedy, ak obsadzovacie čísla v stavoch vystupujúcich v (10) sú všetky rovnaké alebo sa líšia iba „preskokom“ jedinej častice do iného stavu, t. j. ak platí

$$(n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots, n_j, \dots) = (n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots)$$

Podrobná analýza permutácií atď. vedie k výsledku

$$\int \psi_{n_1, \dots, n_i-1, \dots, n_j+1, \dots}^* f \psi_{n_1, \dots, n_i-1, \dots, n_j+1, \dots} = \sum_{j,i} f(j, i) \sqrt{n_i(n_i+1)} \quad (11)$$

a pre diagonálne elementy dostaneme

$$\int \psi_{n_1, n_2, \dots}^* f \psi_{n_1, n_2, \dots} = \sum_j f(j, i) n_j \quad (12)$$

Vo Fokovom priestore má rovnaké maticové elementy operátor

$$F = \sum_{j,i} f(j, i) a_j^\dagger a_i \quad (13)$$

Možno sa o tom presvedčiť jednoduchým priamym výpočtom.

Vyjadrením (13) vieme preložiť každý jednočasticový operátor (9) z „jazyka“ vlnových funkcií do „jazyka“ Fokovho priestoru.

Analogický „preklad“ môžeme urobiť i pre tzv. dvojčasticový operátor, ktorý má vo formalizme vlnových funkcií tvar

$$V = \frac{1}{2} \sum' V(\mathbf{x}_\rho, \mathbf{x}_\sigma) \quad (14)$$

kde sčítujeme cez všetky dvojice súradníc a čiarka nad symbolom sčítovania znamená, že berieme len  $\mathbf{x}_\rho \neq \mathbf{x}_\sigma$ . Pod (14) si môžeme predstaviť potenciálnu energiu sústavy pochádzajúcu od dvojčasticových síl.

Postup by bol rovnaký ako vyššie. Najprv by sme našli maticové elementy  $V$  v jazyku symetrizovaných vlnových funkcií a potom by sme hľadali preklad  $V$  do jazyka Fokovho priestoru. Výpočet maticového elementu je pomerne zdĺhavý a pre čitateľa je užitočnejšie urobiť si jednoduché príklady pre sústavu s 2 či 3 časticami, ako sledovať všeobecný argument. Dobré je ale uvedomiť si, že v maticovom elemente  $V$  máme súčet členov  $V(\mathbf{x}_\rho, \mathbf{x}_\sigma)$  a preto sa „koncový“ stav  $\psi_{n_1, n_2, \dots}$  môže

líšiť od „začiatočného“ iba tým, že sa zmenia kvantové čísla najviac dvoch častíc. Môžeme tiež povedať, že iba dve častice môžu zmeniť svoj stav, ostávajúcich  $N - 2$  musí ostať v pôvodných stavoch.

Ako výsledok prekladu  $V$  do Fokovho priestoru dostaneme

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|V|kl \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \quad (15)$$

kde

$$\langle ij|V|kl \rangle \equiv \int \psi_i^*(\mathbf{x}_\rho) \psi_j^*(\mathbf{x}_\sigma) V(\mathbf{x}_\rho, \mathbf{x}_\sigma) \psi_k(\mathbf{x}_\rho) \psi_l(\mathbf{x}_\sigma) d\mathbf{x}_\rho d\mathbf{x}_\sigma \quad (16)$$

Vzhľadom na to, že v praktických úlohách sa zväčša vyskytujú len jednočasticové a dvojčasticové operátory, môžeme „prekladový slovník“ považovať za prakticky úplný a každý problém môžeme z jazyka vlnových funkcií preložiť do jazyka Fokovho priestoru ešte predtým ako by sme sa pokúšali ho riešiť.

Vzniká prirodzene otázka: načo je takýto preklad užitočný? Odpoveď, ktorú z predchádzajúceho ešte nevidno, je v tom, že preklad do Fokovho priestoru je v skutočnosti prekladom do jazyka kvantovej teórie póla. Po tom, čo sme sa v predchádzajúcej kapitole oboznámili s kvantovaním kmitov struny a opisom elektromagnetického poľa ako sústavy oscilátorov, to ani nie je prekvapujúce. Najprv sme zaviedli jednotlivé „oscilátory“, potom sme ich kvantovali a zavedením kreačných a anihilačných operátorov sme našli vyjadrenia pre operátory polí. Tu sme vlastne postupovali analogicky. Najprv sme vymenovali jednočasticové stavy a potom sme počet častíc v nich vyjadrili pomocou operátorov počtu častíc. Týmto spôsobom počet častíc v danom stave opisujeme veľmi podobne ako stupeň excitácie daného oscilátora.

V nasledujúcom článku si ukážeme, že analógiu možno dotiahnuť až do konca a opis sústavy s mnohými bozónmi viesť celkom v jazyku kvantovej teórie póla.

Doteraz sme hovorili iba o bozónoch, teraz si všimnime modifikácie potrebné pri opise sústavy fermiónov.

Začneme opäť s prípadom  $N$  neintegrujúcich fermiónov. Jednočasticové stavy sú v tomto prípade rovnaké ako pri bozónoch. Rozdiely sa prejavajú až pri konštrukcii viacčasticových stavov. Požiadavka antisymetrie vlnovej funkcie vedie k tomu, že v danom jednočasticovom stave sa môže nachádzať najviac jedna častica. Obsadzovacie čísla jednočasticových stavov teda môžu byť len 0 alebo 1.

Vo Fokovom priestore stavy teda môžeme označiť ako  $|n_1, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ , pričom každá z hodnôt  $n_i$  je buď 0 alebo 1. Takéto stavy určite nemožno vybudovať z „prázdneho“ stavu  $|0, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle$  pomocou kreačných a anihilačných operátorov spĺňajúcich komutačné vzťahy (2) typické pre lineárny harmonický oscilátor, lebo tieto vedú nevyhnutne k existencii obsadzovacích čísel väčších ako jedna.

V prípade bozónov bolo zavedenie kreačných a anihilačných operátorov veľmi užitočné. Definujeme preto takéto operátory i pre sústavu fermiónov a nájdeme, aké algebraické vzťahy musia tieto operátory spĺňať.

Pre jednoduchosť sa na začiatku obmedzme na jediný úplne určený stav fermiónu (charakterizovaný napríklad vlnovým vektorom  $\mathbf{k}$  a priemetom spinu.  $s_z = +1/2$ ), ktorý je v uvažovanej sústave buď „prázdny“ ( $n = 0$ , Fokov vektor  $|0\rangle$ ) alebo „obsadený“ jedinou časticou ( $n = 1$ , Fokov vektor  $|1\rangle$ ).

Pre kreačný a anihilačný operátor definujeme vzťahy

$$a^+|0\rangle = |1\rangle, \quad a|1\rangle = |0\rangle \quad (17)$$

Pretože vyššie obsadzovacie číslo ako 1 je pre fermióny zakázané Pauliho vylučovacím princípom, definujeme

$$a^+|1\rangle = 0, \quad a|0\rangle = 0 \quad (18)$$

Vzťahy (17) a (18) môžeme súhrnne zapísať v tvare

$$a^+|n\rangle = (1-n)|1-n\rangle, \quad a|n\rangle = n|1-n\rangle; \quad n = 0, 1 \quad (19)$$

definujúcom reprezentáciu operátorov  $a^+$ ,  $a$ . Pretože pre  $n = 0, 1$  platí  $n^2 = n$ ,  $(1-n)^2 = 1-n$ ,  $n(1-n) = 0$ , dostaneme

$$a^+a|n\rangle = n|n\rangle, \quad aa^+|n\rangle = (1-n)|n\rangle$$

$$a^+a^+|n\rangle = aa|n\rangle = n(1-n)|n\rangle = 0$$

takže platia operátorové vzťahy

$$aa^+ + a^+a = 1, \quad a^2 = 0, \quad a^{+2} = 0$$

ktoré možno zapísať v tvare

$$\{a, a^+\} = 1, \quad \{a, a\} = \{a^+, a^+\} = 0 \quad (20)$$

kde  $\{F, G\} \equiv FG + GF$  je antikomutátor.

Z antikomutačných vzťahov naopak vyplýva operátorový vzťah  $N^2 = (a^+a)^2 = a^+a = N$ , ktorý obsahuje (ako dôsledok) pôvodný predpoklad, že obsadzovacie číslo  $n$  môže nadobúdať len hodnoty 0 a 1. Kým v prípade bozónov je algebra kreačných a anihilačných operátorov podobná prípadu harmonického oscilátora, pre fermióny sa dá nájsť iná analógia, a to opis spinu  $1/2$ . Túto analógiu použili v prvých prácach o viacfermiónových stavoch Jordan a Wigner (1926 – 1927).

Priemet spinu na istú os tu môže nadobúdať iba dve hodnoty, čo je analógom dvoch možností  $n = 0, 1$  pre dané obsadzovacie číslo. Stav s obsadzovacím číslom 0 môžeme považovať za analóg spinu „dolu“ a stav s obsadzovacím číslom 1 za analóg spinu „hore“. Takto máme

$$|1\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |0\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Kreačný a anihilačný operátor sú potom presným analógom zvyšovacieho a znižovacieho operátora  $J_+$  a  $J_-$ :

$$\mathbf{a} \leftrightarrow J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}^+ \leftrightarrow J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{N} \leftrightarrow J_+ J_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Čitateľ si môže overiť všetky predchádzajúce algebraické vzťahy v tejto maticovej reprezentácii.

Vo všeobecnom prípade je báza tvorená vektormi

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (21)$$

kde  $n_i = 0$  alebo 1 je obsadzovacie číslo  $i$ -tého jednočasticového stavu, charakterizovaného vlnovým vektorom  $\mathbf{k}_i$  a priemetom spinu  $s_{z_i}$ . V zápise (21) sa predpokladá, že (konvenciou) zvolíme určité (fixné) poradie jednočasticových stavov a obsadzovacie čísla zapisujeme v (21) tak, aby to zodpovedalo tomuto poradiu. Kvantové čísla  $(\mathbf{k}_i, s_{z_i})$  nahradíme zas jednoduchším symbolom  $(i)$  a pod  $\delta_{ij}$  budeme chápať súčin

$$\delta_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j}^{(3)} \delta_{s_{z_i}, s_{z_j}}$$

Operátor  $\mathbf{a}_i$  potom označuje anihilačný operátor príslušný k stavu s kvantovými číslami  $(\mathbf{k}_i, s_{z_i})$ .

Podľa vzťahu (20) postulujeme antikomutačné vzťahy

$$\{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i^+\} = 1, \quad \{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j\} = \{\mathbf{a}_i^+, \mathbf{a}_j^+\} = 0 \quad (22)$$

Je samozrejmé, že nestačí iba postulovať komutačné relácie pre sústavu operátorov. Je treba tiež ukázať, že takéto operátory existujú. Ak by sme operátory  $\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i^+$  reprezentovali operáciami

$$\mathbf{a}_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (1 - n_i) |n_1, \dots, 1 - n_i, \dots\rangle \quad (23)$$

$$\mathbf{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, 1 - n_i, \dots\rangle$$

ktoré sú najjednoduchším zovšeobecnením operácií (19) na stavy (21), potom by síce boli splnené vzťahy (22) a takto definované operátory by mali aj všetky ďalšie vlastnosti nutné pre ich fyzikálnu interpretáciu (ako kreačných a anihilačných operátorov v  $i$ -tom jednočasticovom stave), ale operátory s rôznymi indexami  $i, j$  by navzájom komutovali. Ako si ukážeme o chvíľu, je účelné žiadať, aby pri  $i \neq j$  boli splnené *antikomutačné* vzťahy

$$\{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j\} = \{\mathbf{a}_i^+, \mathbf{a}_j^+\} = \{\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j^+\} = 0 \quad (24)$$

Spolu s pravidlami (22) ich možno zapísať jednotne v tvare

$$\{\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_s^+\} = \delta_{r,s} \quad (25)$$

$$\{\mathbf{a}_r, \mathbf{a}_s\} = \{\mathbf{a}_r^+, \mathbf{a}_s^+\} = 0$$

Opäť prirodzene vzniká otázka existencie operátorov spĺňajúcich vzťahy (25) a otázka ako sa ich pôsobenie na stavy (21) líši od operácií (23). Odpoveď na prvú otázku je kladná a na druhú je jednoduchá: na pravých stranách rovníc (23) prídajú len Fermiho faktory usporiadania  $(-1)^{\nu_i}$ , v ktorých  $\nu_i = \sum_{j \subset i} n_j$  a symbol  $j \subset i$  značí, že  $j$  predchádza  $i$  v (21) (t. j. podľa dohodnutého usporiadania). Stav (21) potom môžeme vytvoriť zo stavu  $|0, 0, \dots\rangle$  podľa vzťahu

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = [\mathbf{a}_1^\dagger]^{n_1} [\mathbf{a}_2^\dagger]^{n_2} \dots |0, 0, \dots\rangle \quad (26)$$

Treba si tu všimnúť, že kreačné operátory na pravej strane vystupujú v poradí podľa „dohodnutého usporiadania“. Ak by sme ich napísali v inom poradí, zmenilo by sa v tomto vzťahu nanajvýš znamienko. Znamienko + pritom zodpovedá „dohodnutému poradiu“ a jeho párnym permutáciám, znamienko – prislúcha nepárnym permutáciám usporiadania.

Vráťme sa teraz k otázke účelnosti antikomutačných vzťahov (24). Ako ilustráciu si uvedieme príklad všeobecného stavu dvojfermiónovej sústavy. Tento stav môžeme zapísať ako superpozíciu vektorov  $|0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle$  (obsadzovacie čísla 1 sú na  $i$ -tom a  $j$ -tom mieste). Ak koeficienty v takej superpozícii označíme  $\varphi(i, j)$ , dostaneme všeobecné vyjadrenie

$$|\Phi\rangle = \sum_{i < j} \varphi(i, j) |0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle \quad (27)$$

resp.

$$|\Phi\rangle = \sum_{i < j} \varphi(i, j) \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_j^\dagger |0, 0, \dots\rangle \quad (28)$$

Vo vzťahoch (27), (28) sčítame iba cez usporiadené dvojice indexov  $i < j$ , aby sa vektory bázy  $|0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle$  vyskytovali v súčtoch iba raz. Vo vzťahu (28) však možno jednoducho prejsť k sčítaniu cez všetky  $i, j$  nezávisle, ak využijeme antikomutačné vzťahy (22). Stačí dodefinovať funkciu  $\varphi(i, j)$  (ktorá je zatiaľ vzťahom (27) definovaná len pre  $i < j$ ) nasledovne:

$$\varphi(i, j) = \begin{cases} 0 & \text{pre } i = j \\ -\varphi(i, j) & \text{pre } i < j \end{cases} \quad (28')$$

potom už môžeme (28) zapísať v tvare

$$|\Phi\rangle = \sum_{i, j} \frac{1}{2} \varphi(i, j) \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_j^\dagger |0, 0, \dots\rangle \quad (29)$$

kde už sčítame cez všetky  $i, j$  nezávisle. Voľba antikomutačných vzťahov (24) teda umožnila prejsť od sčítania cez usporiadané dvojice  $i, j$  na sčítanie cez nezávislé dvojice, pričom tak, že funkcia  $\varphi(i, j)$ , ktorá až na normalizačný faktor má zrejme

význam vlnovej funkcie dvojfermiónovej sústavy v  $k$ -reprezentácii, je podľa (29) antisymetrická, ako to vyžaduje Pauliho princíp.

Vráťme sa ešte k prechodu od (28) ku (29). Vo vzťahu (28) sčítujeme len cez  $i < j$  a  $(i, j) \equiv (\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$  je definovaná len na časti priestoru všetkých dvojíc  $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$ . Toto je analógiou systémov s väzbami v klasickej mechanike a hoci by sme mohli pracovať s takto zavedenými stavmi  $|\Phi\rangle$ , bolo by to často nepraktické. Po úplnom definovaní  $\varphi(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$  pomocou (28') pridáme ku vzťahu (29), v ktorom už sčítujeme cez všetky dvojice  $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$  bez obmedzení. Pre výpočty je toto „odstránenie väzby“  $i < j$  veľmi užitočné.

Čitateľ sa sám môže presvedčiť o tom, že pri zápise stavových funkcií v tvare (29) (a jeho zovšeobecneniach na viacčasticové sústavy) zostávajú aj pre fermióny v platnosti tie vyjadrenia jedno- a dvočasticových operátorov vo Fokovom priestore, ktoré sme už odvodili pre sústavy bozónov. Postup dôkazu by bol obdobný ako v prípade bozónov. Využili by sme pri tom, že stavu

$$\mathbf{a}_{i_1}^+ \mathbf{a}_{i_2}^+ \dots \mathbf{a}_{i_N}^+ |0, 0, \dots\rangle \quad (30)$$

zrejme prislúcha vlnová funkcia, daná Slaterovým determinantom

$$\psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{i_1}(\mathbf{x}_1) & \psi_{i_1}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{i_1}(\mathbf{x}_N) \\ \psi_{i_2}(\mathbf{x}_1) & \psi_{i_2}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{i_2}(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{i_N}(\mathbf{x}_1) & \psi_{i_N}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{i_N}(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix} \quad (31)$$

O správnosti tohto vzťahu sa možno presvedčiť aj formálne. V nasledujúcom článku nájdeme vyjadrenie stavu  $|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$  vo Fokovom priestore. Potom sa dá už ľahko overiť, že vlnová funkcia definovaná vzťahom

$$\psi_{i_1, i_2, \dots, i_N}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{a}_{i_1}^+ \dots \mathbf{a}_{i_N}^+ |0, \dots\rangle$$

sa dá vyjadriť v tvare (31). Poznamenajme ešte, že znamienko v (31) je zafixované tým, že v (30) i (31) vystupujú jednočasticové stavy  $i_1, \dots, i_N$  v konvencii určenom poradí. Pretože však platia antikomutačné vzťahy (24), nemusíme túto konvenciu dodržiavať a stačí, aby poradie stavov v (30) a (31) bolo rovnaké. Výmena poradia dvoch jednočasticových stavov potom vedie v (30) k zmene znamienka stavu v dôsledku vzťahov (24) a v (31) v dôsledku toho, že determinant zmení znamienko pri výmene riadkov.

Poznamenajme ešte, že báza, ktorú sme fakticky konštruovali pre systém voľných fermiónov, tvorí úplný systém stavov i pre sústavu interagujúcich fermiónov.

Konštrukcia Fokovho priestoru, tak ako sme ju opísali, nie je jedinou možnosťou. Často je užitočné voliť za jej základ iný systém jednočasticových stavov. Tak

napríklad ak uvažujeme sústavu vzájomne interagujúcich častíc, ktoré sa pohybujú navyše vo vonkajšom poli, potom za jednočasticové stavy môžeme voliť stacionárne stavy v tomto vonkajšom poli, vybudovať na ich základe Fokov priestor a v ďalšom brať interakciu častíc napríklad ako poruchu. Po formálnej stránke sa nič nemení, iba jednočasticové stavy už nebudú rovinné vlny, ale budú charakterizované inými kvantovými číslami.

## 15.6 SEKUNDÁRNE KVANTOVANIE

V tomto článku ukážeme, že opis mnohých častíc vo Fokovom priestore môžeme dostať priamo kvantovaním príslušného poľa. Nezačneme priamo s formalizmom, ale ukážeme najskôr, ako možno zaviesť operátor poľa a vyjadriť pomocou neho hamiltonián sústavy. Pri diskusii budeme uvažovať sústavu  $N$  bozónov.

Jednočasticové stavy sústavy sú opísané vlnovými funkciami<sup>241</sup>  $\psi_i(\mathbf{x})$  a vo Fokovom priestore sú tieto stavy kreované resp. anihilované operátormi  $\mathbf{a}_i^+$ ,  $\mathbf{a}_i$ , pričom tieto operátory spĺňajú vzťahy

$$[\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j] = 0, \quad [\mathbf{a}_i^+, \mathbf{a}_j^+] = 0, \quad [\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j^+] = \delta_{ij} \quad (1)$$

Definujme teraz operátor bozónového poľa  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  a operátor k nemu hermitovsky združený vzťahmi

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) \mathbf{a}_i \quad (2a)$$

$$\hat{\psi}^+(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{x}) \mathbf{a}_i^+ \quad (2b)$$

Na pravých stranách v (2) sú operátory  $\mathbf{a}_i$ ,  $\mathbf{a}_i^+$  a funkcie  $\psi_i(\mathbf{x})$ ,  $\psi_i^*(\mathbf{x})$  majú úlohu koeficientov, závislých od  $\mathbf{x}$ . Fyzikálny význam operátora  $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$  spoznáme, keď nájdeme vlnovú funkciu, zodpovedajúcu stavu

$$\hat{\psi}^+(\mathbf{y})|0\rangle = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{y}) \mathbf{a}_i^+|0\rangle \quad (3)$$

kde  $|0\rangle$  je stav bez častíc.

Keďže stavu  $\mathbf{a}_i^+|0\rangle$  je priradená vlnová funkcia  $\psi_i(\mathbf{x})$  bude superpozíciou (3) priradená superpozícia vlnových funkcií  $\psi_i(\mathbf{x})$  s rovnakými koeficientmi, t. j. vlnová funkcia<sup>242</sup>

<sup>241</sup> Index  $i$  tu zastupuje trojicu  $(k_1, k_2, k_3)$  súradníc vlnového vektora.

<sup>242</sup> Poznamenajme k označeniu:  $\mathbf{x}$  je argument (premenná) vlnovej funkcie,  $\mathbf{y}$  je charakteristika (označenie) stavu (3).



$$\psi_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{y}) \psi_i(\mathbf{x}) = \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

keď sme využili fakt, že  $\psi_i$  tvoria úplný systém. Vidíme, že stavu (3) zodpovedá funkcia „lokalizovaná“<sup>243</sup> v bode  $\mathbf{y}$ . Operátor  $\hat{\psi}^+(\mathbf{y})$  je teda operátorom kreácie častice v bode  $\mathbf{y}$ . Podobne  $\hat{\psi}(\mathbf{y})$  je operátorom anihilácie častice v bode  $\mathbf{y}$ .

Komutačné vzťahy pre operátory  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ ,  $\hat{\psi}^+(\mathbf{y})$  nájdeme ľahko. Napríklad

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] &= [\sum_i \mathbf{a}_i \psi_i(\mathbf{x}), \sum_j \mathbf{a}_j^+ \psi_j^*(\mathbf{y})] = \\ &= \sum_{ij} \psi_i(\mathbf{x}) \psi_j^*(\mathbf{y}) [\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j^+] = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) \psi_i^*(\mathbf{y}) = \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \end{aligned}$$

pričom sme využili komutačné vzťahy (1) a úplnosť systému  $\psi_k(\mathbf{x})$ . Podobne by sme ukázali, že platí:

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = 0, \quad [\hat{\psi}^+(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (4)$$

Pomocou operátorov  $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$  môžeme formálne elegantne vyjadriť niektoré stavy a operátory vo Fokovom priestore, s ktorými sme sa stretli v predchádzajúcom článku. Stav  $N$ -časticovej sústavy, zodpovedajúci časticiam lokalizovaným v bodoch  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$  bude

$$|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_N) |0, 0, \dots\rangle$$

Teraz už môžeme urobiť to, čo sme sľúbili v predchádzajúcom článku za rovnicou (5.6). Výraz na pravej strane (5.6) môžeme podľa (5.3) a podľa predchádzajúcej rovnice zapísať ako

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | n_1, n_2, \dots \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} \dots \\ \dots \langle 0, 0, \dots | \hat{\psi}(\mathbf{x}_N) \dots \hat{\psi}^+(\mathbf{x}_1) (\mathbf{a}_1^+)^{n_1} (\mathbf{a}_2^+)^{n_2} \dots | 0, 0, \dots \rangle \end{aligned}$$

Ak využijeme vyjadrenie  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  v tvare (2a) a komutačné vzťahy (1), dostaneme skutočne pre  $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | n_1, n_2, \dots \rangle$  vyjadrenie (5.1). Podrobnosti prenechávame čitateľovi.

Jedno- a dvojčasticové operátory, t. j.

$$F = \sum_{ij} f(j, i) \mathbf{a}_j^+ \mathbf{a}_i \quad (5)$$

<sup>243</sup> Ide o „zovšeobecnený stav“ v zmysle, ktorý sme použili v 10. kapitole. Tu používaná terminológia nie je dostatočne rigorózna, ale pre dané účely je postačujúca.

kde

$$f(j, i) = \int \psi_j^*(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}$$

a

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i, j, k, l} \langle i, j | V | k, l \rangle a_i^+ a_j^+ a_l a_k$$

kde

$$\langle i, j | V | k, l \rangle \equiv \int \psi_i^*(\mathbf{x}_\alpha) \psi_j^*(\mathbf{x}_\beta) V(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta) \psi_k(\mathbf{x}_\alpha) \psi_l(\mathbf{x}_\beta) d^3 \mathbf{x}_\alpha d^3 \mathbf{x}_\beta \quad (6)$$

môžeme vyjadriť v tvare

$$F = \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} \quad (5')$$

$$V = \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \hat{\psi}^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} \quad (6)$$

Skutočne, ak do (5') dosadíme vyjadrenia (2), pričom v  $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$  označíme sčítovací index ako  $j$  a v  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  ako  $i$ , dostaneme priamo (5). Rovnakým postupom ukážeme tiež, že zo (6') vyplýva (6). Sústava interagujúcich častíc vo vonkajšom poli má hamiltonián, ktorý je súčtom jednočasticových a dvojčasticových operátorov. Ak potenciálna energia častice vo vonkajšom poli je  $U(\mathbf{x})$  a vzájomná interakcia častíc je  $V(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ , máme pre hamiltonián vo Fokovom priestore vyjadrenie

$$H = \int d^3 \mathbf{x} \left[ \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) U(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \right] + \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \hat{\psi}^+(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{y} \quad (7)$$

Prvý člen na pravej strane môžeme prepísať využitím identity  $f\Delta g = \nabla \cdot (f \nabla g) - \nabla f \cdot \nabla g$  a prevedením členu s divergenciou na povrchový integrál pomocou Gaussovej vety. Integrál cez vzdialený povrch kladieme rovný nule, lebo predpokladáme, že stavy, na ktoré (7) pôsobí, sú také, že ich vlnové funkcie v nekonečne vymiznú. Potom prvý člen v (7) bude

$$+ \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 \mathbf{x} \nabla \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) \cdot \nabla \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (7')$$

Pre sústavu fermiónov môžeme všetky predchádzajúce argumenty zopakovať s minimálnymi modifikáciami. Namiesto komutačných vzťahov (1) budeme mať antikomutačné vzťahy. Treba si ale uvedomiť, že v prípade fermiónov nie je jednočasticový stav určený úplne zadaním vlnového vektora  $\mathbf{k}$ , treba ešte špecifikovať

priemet spinu  $s_z$ . Analógom bozónových operátorov poľa  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  potom budú viackomponentné operátory  $\hat{\psi}_s(\mathbf{x})$ , kde rôzne komponenty zodpovedajú rôznym priemietom spinu. Príslušné antikomutačné vzťahy budú mať tvar<sup>244</sup>:

$$\{a_r(\mathbf{k}), a_s(\mathbf{k}')\} = \{a_r^\dagger(\mathbf{k}), a_s^\dagger(\mathbf{k}')\} = 0, \quad \{a_r(\mathbf{k}), a_s^\dagger(\mathbf{k}')\} = \delta_{rk} \delta_{rs} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \{\hat{\psi}_r(\mathbf{x}), \hat{\psi}_s(\mathbf{y})\} &= \{\hat{\psi}_r^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{y})\} = 0 \\ \{\hat{\psi}_r^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{y})\} &= \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \delta_{rs} \end{aligned} \quad (9)$$

Na základe vzťahov (8), (9) si čitateľ môže sám dokázať, že vzťahy (2) – (7) majú pre fermióny presne analogický tvar ako pre bozóny s tým, že tam, kde v prípade bozónov je sčítanie resp. integrácia cez premenné  $\mathbf{k}$  alebo  $\mathbf{x}$ , je v prípade fermiónov ešte aj sčítanie cez komponenty prislúchajúce rôznej orientácii spinu.

Napokon ukážeme, že teória určená hamiltoniánom (7) a komutačnými vzťahmi (4) sa dá získať aj formálnym kvantovaním Schrödingerovej rovnice, chápanej ako rovnica klasického kontinua. Takéto kvantovanie nazývame sekundárnym (primárnym je zavedenie samotnej SchR) a o jeho fyzikálnom zmysle sa zmienime v závere článku.

V predchádzajúcej kapitole sme už uviedli schému kanonického kvantovania kontinua. Podľa nej musíme mať najprv hustotu lagranžiánu, z ktorej pomocou Eulerových-Lagrangeových rovníc dostaneme žiadanú pohybovú rovnicu kontinua; v našom prípade Schrödingerovu rovnicu. Eulerove-Lagrangeove rovnice sú

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left( \frac{\partial \Phi_i}{\partial x_k} \right)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_i} = 0 \quad (10)$$

pre každú nezávislú komponentu poľa  $\Phi_i$ .

Ukážeme najprv, že lagranžián, ktorý vedie na SchR, možno vybrať napríklad v tvare

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V \psi^* \psi \quad (11)$$

kde  $\psi^*(\mathbf{x})$  je funkcia komplexne združená k  $\psi(\mathbf{x})$  a  $V(\mathbf{x})$  označuje potenciál. Zvoľme  $\psi$  a  $\psi^*$  ako dve nezávislé komponenty a dostaneme pohybové rovnice najprv pre variácie voči  $\psi^*$ :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = 0, \quad + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial \psi^* / \partial x_k)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k \psi, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = i\hbar \dot{\psi} - V \psi$$

<sup>244</sup> Tu už vypisujeme explicitne všetky kvantové čísla.

a po dosadení do (10) dostaneme SchR

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi$$

Pohybové rovnice vyplývajúce zo stacionárnosti voči variáciám  $\psi$  budú

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \psi^*, \quad + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial \psi / \partial x_k)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k \psi^*, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = -V\psi^*$$

a dosadením do (10) prídeme k rovnici komplexne združenej k (12), takže formalizmus je konzistentný.

Pre hybnosti kanonicky združené k  $\psi$ ,  $\psi^*$  máme

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \psi^* \quad (13)$$

$$\pi^* = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} = 0 \quad (14)$$

Rovnice (13) a (14) predstavujú istý problém pri aplikácii kanonického formalizmu, ktorý potrebujeme na to, aby sme mohli systém kvantovať. Ukazujú, že očakávané kanonické premenné  $\psi$ ,  $\psi^*$ ,  $\pi$ ,  $\pi^*$  nie sú navzájom nezávislé, systém má fakticky menší počet stupňov voľnosti než by sme naivne očakávali. Z rovníc (13) a (14) je súčasne zrejmý i spôsob riešenia problému, za nezávislé kanonicky združené premenné stačí brať  $\psi$  ako „zovšeobecnenú súradnicu“ a  $\pi$  ako k nej „zovšeobecnenú hybnosť“. Hustotu hamiltoniánu sústavy potom dostaneme už podľa štandardného postupu:

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\psi} - \mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + V \psi^* \psi \quad (15)$$

Pre celkovú energiu platí:

$$H = \int \mathcal{H} d^3 \mathbf{x} = \int d^3 \mathbf{x} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi + V \psi^* \psi \right\} \quad (16)$$

Doteraz sme stále hovorili o klasickom kontinuu. Ku kvantovej teórii tohto „Schrödingerovho kontinua“ prejdeme tak, že kanonicky združené veličiny  $\pi$ ,  $\psi$  sa stanú operátormi spĺňajúcimi komutačný vzťah

$$[\hat{\pi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = -i\hbar \delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (17)$$

Vzhľadom na vzťah (13) to ale znamená

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = -\delta^{(3)}(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (18)$$

Okrem toho budú platiť ešte komutačné vzťahy

$$[\hat{\psi}^+(\mathbf{x}), \hat{\psi}^+(\mathbf{y})] = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = 0 \quad (18b)$$

Lahko si môžeme všimnúť, že vzťahy (18), ktoré sme tu dostali sekundárnym kvantovaním „Schrödingerovho kontinua“ sú presne rovnaké ako vzťahy (4) odvodené vyššie pre operátory  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ ,  $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$  zavedené celkom iným spôsobom, t. j. ako operátory anihilácie, resp. kreácie častice v danom bode  $\mathbf{x}$ . Doteraz sme vlastne ani nemali právo označovať tieto dve veci rovnakým symbolom  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ , pretože sme  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  vo vzťahoch (2) a  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  pri kvantovaní SchR zavádzali logicky úplne nezávisle. Akonáhle sme však už dospeli ku vzťahom (18), môžeme prísť rýchlo aj ku kreačným a anihilačným operátorom a ku komutačným vzťahom (1). Stačí zapísať formálne rozklady (2) so zatiaľ neznámymi operátormi  $a_i$ ,  $a_i^+$ , dosadiť tieto rozklady do (18), násobiť to, čo takto dostaneme funkciami  $\psi_i(\mathbf{x})\psi_i^*(\mathbf{x})$  a integrovať cez celý priestor v  $\mathbf{x}$  a v  $\mathbf{y}$ . Prídeme tak priamo ku komutačným vzťahom (1) a tieto komutačné vzťahy už vedú k interpretácii  $a_i$  ako anihilačného a  $a_i^+$  ako kreačného operátora (celkom rovnako ako pri diskusii lineárneho harmonického oscilátora v energetickej reprezentácii).

Identičnosť oboch formalizmov, t. j. Fokovho priestoru a sekundárneho kvantovania je úplná. Ak v hamiltoniáne sústavy danom vzťahom (16) chápeme  $\hat{\psi}$ ,  $\hat{\psi}^+$  ako operátory spĺňajúce komutačné vzťahy (18), dostaneme práve prvé dva členy v (7) s úpravou naznačenou v (7'). Celý hamiltonián (7) by sme dostali, keby sme do lagranžianu 1 použitom pri zostavovaní Schrödingerovej rovnice pridali ešte člen rovný ostatnému členu v (7) so záporným znamienkom.

Vzniká ešte otázka fyzikálneho zmyslu Schrödingerovho kontinua, ktoré sme tu kvantovali. Otázku chápeme takto: Ak kvantujeme kmity struny, dostaneme kvantá týchto kmitov (nazývané fonónmi), ak kvantujeme elektromagnetické pole (t. j. opíšeme ho ako sústavu oscilátorov), dostaneme kvantá tohto póla, t. j. fotóny. Pýtame sa na to, čo sme vlastne kvantovali, keď sme dostali ako kvantá poľa bozóny vo vonkajšom potencionáli? Odpoveď nie je jednoduchá, pretože v bežnej praxi sa nestretávame s klasickým Schrödingerovým kontinuumom, t. j. s makroskopickou veličinou opísanou riešením SchR. V extrémnych situáciách ale také sústavy existujú. Elektróny v supravodiči si napríklad v istom priblížení môžeme predstaviť ako pospájané do tzv. Cooperových párov, ktoré sú už bozónmi. Makroskopický stav supravodiča potom možno opísať vlnovou funkciou<sup>245</sup>, ktorá spĺňa SchR. Jednotlivé bozóny sú potom kvantami tohto makroskopického Schrödingerovho poľa. Podobná situácia vzniká vtedy, keď sa sústava bozónov pri nízkej teplote dostáva do jediného jednočasticového kvantového stavu, napr. atómy He<sup>4</sup> pri nízkej teplote (Boseho-Einsteinova kondenzácia).

<sup>245</sup> Pozri diskusiu v poslednom článku posledného dielu Feynmanových prednášok z fyziky.

Doteraz sme hovorili iba o sekundárnom kvantovaní SchR pre sústavu bozónov. Pre sústavu fermiónov postupujeme úplne rovnako, iba pri uvádzaní vzťahov (17) a (18) použijeme namiesto komutátorov antikomutátory, takže dostaneme

$$\begin{aligned} \{\psi_r(\mathbf{y}), \psi_s^\dagger(\mathbf{x})\} &= \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta_{rs} \\ \{\psi_r(\mathbf{y}), \psi_s(\mathbf{x})\} &= \{\psi_r^\dagger(\mathbf{y}), \psi_s^\dagger(\mathbf{x})\} = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Spôsobom naznačeným za rovnicou (18) odtiaľto, po použití rozkladov (2), pridáme k antikomutačným vzťahom (5.24).

## 15.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Napíšte explicitne vlnovú funkciu základného stavu atómu Li v priblížení, v ktorom zanedbávate interakciu elektrónov. Úlohu riešte dvomi spôsobmi: a) Slaterovým determinantom; b) tak, že napíšete  $\Sigma(-1)^{\eta} f(x_1)g(x_2)h(x_3)$ , sčítajte cez všetky permutácie  $(x_1, x_2, x_3)$  a číslo  $\eta$  položte rovné počtu transpozícií, ktorými sa od pôvodného poradia dostanete k danej permutácii.
- Predstavte si, že sa podarilo vyrobiť atóm Li, v ktorom sú všetky tri elektróny nahradené  $\pi^-$ -mezónmi.  $\pi^-$ -mezóny sú bozóny s nulovým spinom, ich hmotnosť je asi  $140 \text{ MeV}/c^2$ .
  - Ako by vyzerala vlnová funkcia základného stavu takéhoto atómu pri zanedbaní vzájomnej elektrostatickej interakcie  $\pi^-$ -mezónov?
  - Ako by v tomto priblížení vyzerala vlnová funkcia prvého excitovaného stavu? Prediskutujte aj jej normalizáciu.
- Atóm uhlíka má šesť elektrónov: dva v stave  $1s$ , dva v stave  $2s$  a dva v stave  $2p$ . Uvažujme teraz len tieto dva  $2p$  elektróny. Každý z nich má  $l = 1$  a  $s = 1/2$ . Ich celkový moment hybnosti môže byť teda  $L = 0, 1, 2$  a ich celkový spin môže byť  $0$  alebo  $1$ . Sú všetky kombinácie  $(L, S)$  povolené Pauliho princípom?  
Pripomienka: Ak z dvoch vektorov vytvárame skalár alebo symetrický bezstopový tenzor, bude výsledok symetrický, ak vytvárame vektor, bude antisymetrický.
- Predstavte si molekulu vodíka  $H_2$  ako dva protóny v určitých pevných polohách a dva elektróny pohybujúce sa v tomto poli. Navrhnite tvar vlnovej funkcie dvojelektrónovej sústavy pri zanedbaní vzájomnej interakcie elektrónov. Prediskutujte celkový spin dvojice elektrónov a porozmýšľajte o tom, aký celkový spin elektrónov bude mať asi molekula  $H_2$  v základnom stave.
- Atómové jadro si vo veľmi hrubom priblížení môžeme predstaviť ako súbor neinteragujúcich nukleónov v trojrozsiernej potenciálovej jame s istou hĺbkou  $-V_0$  a istým polomerom  $R_0$ . Naznačte, ako by ste v tomto zjednodušenom modeli konštruovali vlnovú funkciu jadra uhlíka v základnom stave!
- Dokážte, že stavy lineárneho harmonického oscilátora dané ako  $|n\rangle = (n!)^{-1/2}(\mathbf{a}^\dagger)^n|\psi_0\rangle$  tvoria ortonormovaný systém, ak základný stav  $|\psi_0\rangle$  spĺňa podmienky  $\mathbf{a}|\psi_0\rangle = 0$ ,  $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$  a ak platí  $[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = 1$ .
- Uvažujte sústavu neinteragujúcich elektrónov. Kreačné a anihilačné operátory spĺňajú vzťahy:  $\{\mathbf{a}^\dagger(\mathbf{k}, s), \mathbf{a}(\mathbf{q}, s')\} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q})\delta_{ss'}$ , a ostatné antikomutátory sú nulové. Zavedte operátory  $\mathbf{B}^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{k}, \uparrow)\mathbf{a}^\dagger(\mathbf{k}', \downarrow)$ . Nájdite komutačný vzťah

$$[\mathbf{B}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'), \mathbf{B}^\dagger(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] = 0$$

Prediskutujte fyzikálny význam operátorov  $B^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  a stavov typu

$$b^+(\mathbf{p}, \varphi)|0\rangle \equiv \int \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{k}') B^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k} - \mathbf{q}) d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{k}' |0\rangle$$

Nájdite komutačné vzťahy operátorov typu  $b^+(\mathbf{p}, \varphi)$  z predchádzajúceho výrazu.

8. Nech  $\hat{\psi}_k(\mathbf{x})$  je operátor sekundárne kvantovaného bozónového poľa

$$\hat{\psi}_k(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{a}(\mathbf{k}) \psi_k(\mathbf{x})$$

kde  $\{\psi_k(\mathbf{x})\}$  je ortonormovaný súbor jednočasticových vlnových funkcií a kreačné a anihilačné operátory  $\mathbf{a}^+(\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{a}(\mathbf{q})$  spĺňajú komutačný vzťah

$$[\mathbf{a}(\mathbf{q}), \mathbf{a}^+(\mathbf{k})] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$$

Ukážte, že platí

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^*(\mathbf{y})] = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

Interpretujte fyzikálne tento výsledok.

Návod: Začnite s tým, že uvážite strednú hodnotu predchádzajúceho komutátora vo vákuovom stave a potom vo všeobecnom  $n$ -časticovom stave.

9. Nájdite maticový element  $\langle \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 | V | \mathbf{q}_3 \mathbf{q}_4 \rangle$  operátora  $V$  daného explicitne v texte za rovnicou (6.5).

Stavy  $|\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2\rangle$  a  $|\mathbf{q}_3 \mathbf{q}_4\rangle$  sú  $|\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2\rangle = \mathbf{a}^+(\mathbf{q}_1) \mathbf{a}^+(\mathbf{q}_2) |0\rangle$ .

Výpočet urobte pre fermióny i pre bozóny.