

Azonos részecskékből álló rendszerek

December 10, 2006

1 Azonos részecskékből álló rendszerek hullámfüggvénye

A kvantummechanika keretében az azonos részecskék elvesztik identitásukat, aminek következtében megkülönböztethetetlenek. Ezen megkülönböztethetlenségének következtében N azonos részecskékből álló rendszerre az lenne az ideális hogyha a rendszert egy

$$\psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

hullámfüggvénnyel tudnánk leírni. (*Megjegyzés:* A következőkben a könnyebb követhetőség érdekében az állapotvektorok helyett a koordinátatérbeli hullámfüggvényt használjuk a kvantummechanikai állapot jellemzésére. Minden kijelentésünk azonban egyszerűen általánosítható a rendszert jellemző állapotvektorra is!) Ilyen hullámfüggvény használatával a $\psi(\vec{r}, t)$ hullámfüggvény modulusz négyzete

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (2)$$

arányos lenne a tér adott pontján a részecske sűrűséggel. A normálási feltétel meg

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = N, \quad (3)$$

lenne. A több részecskéből álló kvantummechanikai rendszerek ilyen leírása azonban sajnos nem megy, ugyanis a fentebb bemutatott ψ függvényre nem tudunk Schrödinger egyenletet felírni !

Több részecskékből álló rendszer esetén a

$$H = H(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) \quad (4)$$

Hamilton függvényből indulunk ki. Ezt átírva a kvantummechanika keretében bevezetett operátorokkal, megkapjuk a Schrödinger egyenlet felírásához szükséges Hamilton operátort:

$$\hat{H} = \hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, -i\hbar\vec{\nabla}_1, -i\hbar\vec{\nabla}_2, \dots, -i\hbar\vec{\nabla}_N). \quad (5)$$

A Hamilton operátor alakjából azonnal látható, hogy a használandó hullámfüggvény $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ alakú kell legyen. Ezen hullámfüggvény modulusz négyzete megadja annak a valószínűség-sűrűségét, hogy egy adott t időpillanatban az, 1 részeke a tér $\vec{r}_1$ és $\vec{r}_1 + d\vec{r}_1$ koordinátái között legyen és, ugyanakkor a 2 részeke a tér $\vec{r}_2$ és $\vec{r}_2 + d\vec{r}_2$ koordinátái között legyen,... és hogy az N -edik részeke a tér $\vec{r}_N$ és $\vec{r}_N + d\vec{r}_N$ koordinátái között legyen:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = P(\vec{r}_1, \vec{r}_1 + d\vec{r}_1; \vec{r}_2, \vec{r}_2 + d\vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{r}_N + d\vec{r}_N; t) \quad (6)$$

Ezen hullámfüggvényre a normálási feltétel:

$$\int_{\{\vec{r}_1\}} \int_{\{\vec{r}_2\}} \dots \int_{\{\vec{r}_N\}} |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = 1 \quad (7)$$

A Schrödinger egyenlet ebben az esetben:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, -i\hbar \vec{\nabla}_1, -i\hbar \vec{\nabla}_2, \dots, -i\hbar \vec{\nabla}_N) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = i\hbar \frac{d\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)}{dt} \quad (8)$$

A feladatot elbonyolítja az, hogy a $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ többrészeske hullámfüggvényre plusz feltételeket kell kiköszünk azért, hogy a részecskék megkülönböztethetlensége figyelembe legyen véve.

2 Két azonos részecske esete

Tekintsük először **két azonos részecske esetét**. A részecskék megkülönböztethetlensége következtében a Hamilton függvény (és ezáltal a Hamilton operátor) invariáns kell legyen a részecskék felcserélésére:

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (9)$$

Bevezetjük a $\hat{P}$ permutálási operátort (ami egy hermitikus operátor) amelynek a hatása a definíció szerint:

$$\hat{P}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (10)$$

Tétel: A részecskék megkülönböztethetlenségéből azonnal következik, hogy a két részecske rendszerét leíró tetszőleges fizikai mennyiséghez rendelt $\hat{F}$ operátorra igaz, hogy:

$$[\hat{P}, \hat{F}] = [\hat{F}, \hat{P}] = 0 \quad (11)$$

Bizonyítás: Legyen $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ egy tetszőleges hullámfüggvény és tételezzük fel, hogy:

$$\hat{F}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (12)$$

A részecskék megkülönböztetlenségéből következik, hogy:

$$\hat{F}\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t) = \varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t) \quad (13)$$

Ekkor:

$$\begin{aligned} [\hat{P}, \hat{F}]\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t) &= (\hat{P}\hat{F} - \hat{F}\hat{P})\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t) = \\ &= \hat{P}\varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t) - \hat{F}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) - \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

Speciális esetben, ha $\hat{F}$ a Hamilton operátor akkor: $[\hat{P}, \hat{H}] = [\hat{H}, \hat{P}] = 0$.

Tekintsük most a $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ hullámfüggvényeket, amelyek legyenek egy adott $\{\hat{H}, \hat{F}_1, \hat{F}_2, \dots, \hat{P}\}$ teljes fizikai mennyiség rendszer tiszta állapotainak megfelelő hullámfüggvények. A tétel értelmében a $\hat{P}$ és ezen mennyiségeknek kell legyen egy közös sajátfüggvény-rendszere ami egy bázist alkot a Hilbert-téren, vagyis a $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ függvények sajátfüggvényei kell legyenek a $\hat{P}$ operátornak is. Innen azonnal következnek az alábbi egyenletek:

$$\begin{aligned} \hat{P}\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \lambda\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ \hat{P}^2\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \hat{P}\varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ \Rightarrow \lambda^2 &= 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1 \text{ mert } \lambda \in \mathbf{R} \end{aligned} \quad (15)$$

A $\lambda = 1$ esetben $\hat{P}\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ vagyis a hullámfüggvény **szimmetrikus**. A $\lambda = -1$ esetben $\hat{P}\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$, ami azt jelenti, hogy a hullámfüggvény **antiszimmetrikus**.

A fentiek alapján tehát két azonos részecskéből álló rendszer tiszta állapotainak vagy szimmetrikus vagy antiszimmetrikus hullámfüggvények felelnek meg.

Most néhány lényeges megjegyzés:

1. Legyen $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a $\hat{H}$ operátornak egy sajátfüggvénye. (Ez az előbbiek alapján nem feltétlenül kell szimmetrikus vagy antiszimmetrikus legyen, ugyanis ez nem feltétlenül egy tiszta állapot !)

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (16)$$

Azonban

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) &= \hat{H}\hat{P}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{P}\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \\ &= \hat{P}E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \end{aligned} \quad (17)$$

tehát ilyenkor a $\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ is sajátfüggvény, és szintén az E sajátértékhez tartozik. $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ és $\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ nem feltétlenül szimmetrikus vagy antiszimmetrikus de ezek lineáris kombinációjával mindig képezhető egy szimmetrikus és egy antiszimmetrikus hullámfüggvény

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = k[\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)] \quad (18)$$

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = k'[\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)], \quad (19)$$

amelyek sajátfüggvényei a $\hat{H}$ operátornak is:

$$\hat{H}\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (20)$$

$$\hat{H}\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (21)$$

A fentiek értelmében $\hat{H}$ -nak bármely nem szimmetrikus és nem antiszimmetrikus sajátállapota legalább kétszer elfajult kell legyen! (Vagy, az összes nem elfajult sajátállapotok vagy szimmetrikusak vagy antiszimmetrikusak a két részecske felcserélésére.)

2. Mivel $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$, P egy mozgásállandó, tehát a $\hat{P}$ sajátértéke időben állandó. Vagyis:

- A részecskék felcserélésére szimmetrikus hullámfüggvény szimmetrikus marad az időben.
- A részecskék felcserélésére antiszimmetrikus hullámfüggvény antiszimmetrikus marad az időben.

3 N azonos részecske esete

N azonos részecske esetén is hasonlóan járunk el mint ahogyan a két részecske esetén tettük. Értelmezhetjük a, $\hat{P}_{ij}$, két részecskét transzponáló (kicserélő) operátort.

$$\hat{P}_{ij}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, t) \quad (22)$$

Az összes P_{ij} , $i, j \in \overline{1, N}$ -re igazak a két részecske esetén felírt egyenlőségek.

$$[\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0, \forall i, j \in \overline{1, N}, i \neq j \quad (23)$$

$$[\hat{P}_{ij}, \hat{F}] = 0, \forall i, j \in \overline{1, N}, i \neq j \quad (24)$$

Azonnal adódik, hogy a tiszta állapotok mind sajátfüggvényei kell hogy legyenek az összes $\hat{P}_{ij}$ operátornak!

$$\hat{P}_{ij}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, t) = \pm\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, t) \quad (25)$$

Ezen alapján kijelenthetjük, hogy:

- Bármely tiszta állapot szimmetrikus vagy antiszimmetrikus kell legyen az összes $\hat{P}_{ij}$ két részecskét transzponáló operátorokra.
- Ahhoz hogy ne keveredjünk ellentmondásba az szükséges, hogy az összes $\hat{P}_{ij}$ -hez rendelt sajátérték vagy mind +1 vagy mind -1 kell legyen ! Hogy

belássuk, milyen ellentmondások léphetnének fel ellenkező esetben, tekintsük a következő azonnali példát:

Legyen az $(1, 2, 3)$ tiszta állapot hullámfüggvénye $(1, 2, 3) \equiv \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$ és legyen például

$$\begin{cases} \hat{P}_{12}(1, 2, 3) = -1(2, 1, 3) \\ \hat{P}_{23}(1, 2, 3) = -1(1, 3, 2) \\ \hat{P}_{13}(1, 2, 3) = +1(3, 2, 1) \end{cases} \quad (26)$$

Igen, de $\hat{P}_{13} = \hat{P}_{12}\hat{P}_{23}\hat{P}_{12} \Rightarrow \hat{P}_{13}(1, 2, 3) = -1(3, 2, 1)$ ami ellentmondás azzal ahogy a $\hat{P}_{13}$ operátor hatását definiáltuk az $(1, 2, 3)$ állapotra!

A tiszta állapotokban tehát az N részecske állapotot megadó hullámfüggvény vagy szimmetrikus az összes részecske transzponálására vagy antiszimmetrikus.

- Ha az összes P_{ij} sajátérték 1, akkor $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ szimmetrikus hullámfüggvény a részecskék felcserélésére:

$$\hat{P}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \bigcup_{i \neq j} P_{ij}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_{p1}, \vec{r}_{p2}, \dots, \vec{r}_{pN}) \quad (27)$$

(a fenti összefüggésben $(p_1, p_2, \dots, p_N)$ az $(1, 2, \dots, N)$ egy adott permutációját jelentette.)

- Ha az összes P_{ij} sajátérték -1, akkor $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ egy tökéletesen antiszimmetrikus hullámfüggvény a részecskék felcserélésére:

$$\hat{P}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \bigcup_{i \neq j} P_{ij}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = (-1)^N \psi(\vec{r}_{p1}, \vec{r}_{p2}, \dots, \vec{r}_{pN}) \quad (28)$$

(N a végzett transzpozíciók száma).

A tiszta állapotot tehát olyan hullámfüggvények írják le amelyek vagy tökéletesen szimmetrikusak vagy tökéletesen antiszimmetrikusak a részecskék felcserélésére! A természet azt az érdekes tulajdonságot mutatja, hogy egy adott típusú részecske esetén vagy csak a szimmetrikus állapotok léteznek vagy csak az antiszimmetrikus állapotok léteznek.

Az egész spinű részecskék (a **bozonok**) csak a részecskék felcserélésére szimmetrikus hullámfüggvénnyel jellemzett tiszta állapotokban létezhetnek.

A feles spinű részecskék (a **fermionok**) csak a részecskék felcserélésére antiszimmetrikus hullámfüggvénnyel jellemzett tiszta állapotokban létezhetnek.

Ha van egy $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ hullámfüggvényünk, ebből szerkeszthetünk egy szimmetrikus vagy egy antiszimmetrikus hullámfüggvényt is - szimmetrizálással vagy antiszimmetrizálással.

A szimmetrizálás. A szimmetrizálást az egyszerű

$$\varphi_S = k \sum_p \hat{P}\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (29)$$

művelettel végezhetjük el. A fenti képletben $\sum_p$ szummázást jelent az $(1, 2, \dots, N)$ indexek összes lehetséges permutálására.

Az antiszimmetrizálást a

$$\varphi_A = k \sum_p \delta_P \hat{P} \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (30)$$

szummázással végezzük el. A fenti szummában $\delta_P = \pm 1$ attól függően, hogy az adott permutációt páros vagy páratlan számú transzpozícióval kapjuk.

Legyen most N azonos részecskéből álló rendszerünk, amelyben a részecskék egymással nem hatnak kölcsön. Legyenek a lehetséges egyrészecske hullámfüggvény állapotok $\psi_i(\vec{r})$, $i = \overline{1, \infty}$, és legyenek az elfoglalt állapotok: $\{a, b, \dots, k\}$. Mivel a rendszer egymással nem kölcsönható részecskéből áll, a rendszer ezen állapotát leíró hullámfüggvényt felírhatjuk, mint:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) \dots \psi_k(\vec{r}_N). \quad (31)$$

Az így megszerkesztett ψ hullámfüggvény nem feltétlenül szimmetrikus vagy antiszimmetrikus. Ezt a függvényt tehát szimmetrizálni vagy antiszimmetrizálni kell aszerint, hogy bozonjaink vagy fermionjaink vannak.

Bozonokra szimmetrizálni fogunk:

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = k \sum_p \hat{P} \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) \dots \psi_k(\vec{r}_N) \quad (32)$$

A k konstans meg tudjuk határozni, ha normált függvényeket akarunk, és a szummában csak egymástól független tagokat tekintünk. (Ahhoz, hogy belássuk melyek az egymástól független tagok, lényeges felhívunk a figyelmet arra, hogy az $a, b, \dots, k$ állapotok nem feltétlenül egymástól különbözőek!. Ezért ha például két helyen szerepel az a állapot, erre a két részecskére vonatkozó felcserélés nem ad egymástól független állapotot!). A normálási feltétel:

$$\int_{V \times V \times \dots \times V} |\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N = 1 \quad (33)$$

Tételezzük fel, hogy az egyrészecske állapotok normáltak:

$$\int_V |\psi_i(\vec{r}_i)|^2 d\vec{r}_i = 1 \quad (34)$$

Egyszerű kombinatorikával belátható, hogy a szummázásban a független tagok száma $\frac{N!}{N_a! N_b! \dots N_k!}$, ahol N_i megadja az i egyrészecske állapotban levő részecskék számát. Azonnal következik, hogy:

$$k = \sqrt{\left(\frac{N_a! N_b! \dots N_k!}{N!} \right)} \quad (35)$$

Fermionokra antiszimmetrizáljuk az egyrészecske állapotokból felépített hullámfüggvényt.

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = k \sum_p \delta_P \hat{P} \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) \dots \psi_k(\vec{r}_N) \equiv \quad (36)$$

$$\equiv k \begin{vmatrix} \psi_a(\vec{r}_1) & \psi_a(\vec{r}_2) & \dots & \psi_a(\vec{r}_N) \\ \psi_b(\vec{r}_1) & \psi_b(\vec{r}_2) & \dots & \psi_b(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_k(\vec{r}_1) & \psi_k(\vec{r}_2) & \dots & \psi_k(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

Az antiszimmetrizált hullámfüggvényt ilyen esetben a megadott determináns kifejtésével kapjuk meg. Látható, hogy ha itt két állapot azonos, akkor a fentebbi determináns (amit Slater determinánsnak nevezünk) nulla. Tehát ahhoz, hogy egy teljesen antiszimmetrikus zérótól különböző hullámfüggvényt felírassunk, két fermion nem lehet ugyanabban a kvantumállapotban. Ez a jól ismert **Pauli-féle kizárási elv**.

A statisztikus fizika keretében tanultuk, hogy a bozonokra és a fermionokra különböző típusú statisztika jellemző. Ez annak tulajdonítható, hogy a fermionokra igaz a Pauli-féle kiválasztási elv, a bozonokra nem. Ezen állítást sikerült itt igazolni.

A k normálási konstans fermionok esetére így $\sqrt{\frac{1}{N!}}$, vagyis a normált teljesen antiszimmetrizált hullámfüggvény:

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sqrt{\frac{1}{N!}} \begin{vmatrix} \psi_a(\vec{r}_1) & \psi_a(\vec{r}_2) & \dots & \psi_a(\vec{r}_N) \\ \psi_b(\vec{r}_1) & \psi_b(\vec{r}_2) & \dots & \psi_b(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_k(\vec{r}_1) & \psi_k(\vec{r}_2) & \dots & \psi_k(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (37)$$

4 Spinnel rendelkező részecskék

A spinnel rendelkező részecskék teljes hullámfüggvénye (állapotvektora) kell szimmetrikus vagy antiszimmetrikus legyen a részecskék felcserélésére. A teljes állapotvektor (hullámfüggvény) amint már említettük két tagból áll, az egyik az orbitális $\vec{r}$ változóktól függ, a másik meg az s spinváltozóktól függ. A fermionok esetén ez a teljes hullámfüggvény kell antiszimmetrikus legyen a részecskék felcserélésére, a bozonok esetén meg a teljes hullámfüggvény kell szimmetrikus legyen a részecskék felcserélésére.

4.1 A kicserélődési kölcsönhatás

Legyen egy két, spinnel rendelkező azonos részecskéből álló kvantummechanikai rendszerünk mágneses tér hiányában, és vizsgáljuk a nemrelativisztikus esetet. Elhanyagolva a spin-pálya kölcsönhatást a teljes hullámfüggvényt felírhatjuk mint:

$$\psi(\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2) = \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi(s_1, s_2) \quad (38)$$

A Schrödinger egyenlet megoldásával meghatározzuk $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ -t, de mágneses tér hiányában $\varphi(s_1, s_2)$ határozatlan marad.

Az a tény, hogy a rendszer teljes hullámfüggvényének egy jól meghatározott szimmetriája van (szimmetrikus vagy antiszimmetrikus a részecskék felcserélésére) fontos következményekkel jár. Egy azonnali következmény az lesz, hogy nem

minden stacionárius állapot (és ezáltal energianívó) amit az orbitális változóktól függő Schrödinger egyenlet megoldásával kapunk elfogadható a rendszerre, ha a hullámfüggvény spintől függő része adott!

- Azon állapotok amelyek antiszimmetrikus ϕ -vel rendelkeznek, csak akkor fogadhatók el bozonok esetén, hogyha $\varphi(s_1, s_2)$ is antiszimmetrikus (fermionok esetén ha $\varphi(s_1, s_2)$ szimmetrikus).
- Azon állapotok amelyek szimmetrikus ϕ -vel rendelkeznek, csak akkor fogadhatók el bozonok esetén, hogyha $\varphi(s_1, s_2)$ is szimmetrikus (fermionok esetén ha $\varphi(s_1, s_2)$ antiszimmetrikus).

Mivel a $\varphi(s_1, s_2)$ szimmetrikus vagy antiszimmetrikus volta függ az eredő spin értékétől (amint ezt két impulzusnyomaték összeadásánál láttuk), azt kapjuk, hogy indirekt módon a spin-változók befolyásolhatják a többreszecskéből álló kvantummechanikai rendszer alapállapotának az energiáját!

Tekintsünk példaként egy konkrét esetet, legyen két $+\frac{1}{2}$ spinnel rendelkező részecskénk. Az eredő spin legyen S , az eredő állapotok meg $|S, M\rangle$.

$$\left\{ \begin{array}{l} s_1 = \frac{1}{2} \\ m_1 = \frac{1}{2} \end{array} \right\} ; \left\{ \begin{array}{l} s_2 = \frac{1}{2} \\ m_2 = \frac{1}{2} \end{array} \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} S = \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 0 \end{array} \right. \\ M = \left\{ \begin{array}{l} \pm 1, 0 \\ 0 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (39)$$

A lehetséges $|S, M\rangle$ állapotok:

$$|S, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2 \right\rangle \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2 | S, M \rangle, \quad (40)$$

vagy, kifejtve a lehetséges S és M értékek szerint:

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ |1, 0\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, 0 \rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 0 \rangle \\ |1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 1, -1 \rangle \\ |0, 0\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 0, 0 \rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 0, 0 \rangle \end{array} \right. \quad (41)$$

Bevezetjük most az egyszerűbb jelölést

$$\left\{ \begin{array}{l} |++\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ |+-\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |-+\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ |--\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{array} \right. \quad (42)$$

és behelyettesítjük a Clebsch-Gordan együtthatók értékeit. Azt kapjuk, hogy az $S = 1$ esetben az eredő impulzusnyomaték állapotvektor szimmetrikus a két részecske felcserélésére, míg az $S = 0$ esetben antiszimmetrikus a két részecske felcserélésére:

S=1 esetén szimmetrikus állapotvektorokat kapunk:

$$\begin{cases} |1, 1\rangle = |++\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-+\rangle \\ |1, -1\rangle = |--\rangle \end{cases} \quad (43)$$

S=0 estén egy antiszimmetrikus állapotvektort kapunk:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+-\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-+\rangle \quad (44)$$

Mivel az $s = 1/2$ (vagyis fermionok vannak), ha $S = 1$ akkor csak az antiszimmetrikus orbitális állapotokhoz tartozó energiaértékek valósulnak meg. Ha meg $S = 0$ akkor csak a szimmetrikus orbitális állapotokhoz tartozó energiaértékek valósulhatnak meg!

Azonnali következmény tehát: habár a H független a spin változóktól, a rendszer energiája indirekt módon függ az eredő spin értékétől. Ez a tény befolyásolhatja az alapállapot energiáját is S függvényében. Legyen például az alapállapot energiája E_0 és tételzzük fel, hogy ez az állapot szimmetrikus az orbitális változók felcserélésére. Legyen az első gerjesztett szint energiája E_1 , és az ehhez a szinthez tartozó sajátállapot legyen antiszimmetrikus az orbitális változók felcserélésére. (Tekintsük úgy, hogy az alapállapot, mint pedig az első gerjesztett állapot nem elfajult sajátállapotai a $\hat{H}$ operátornak.) A fenti feltételek mellett azonnal belátható, hogy ha a két fermion spinje úgy adódik össze, hogy $S = 1$, akkor az alapállapot energiája E_1 lesz, ha meg úgy adódik össze, hogy $S = 0$, akkor az alapállapot energiája E_0 lesz.

Ezen spinváltozókon keresztül indirekt módon létrejövő kölcsönhatást **kicserélődési kölcsönhatásnak** nevezzük.

5 Több elektronos atomok

Többelektronos atomok esetén figyelembe kell venni, hogy az elektronok fermionok és igaz rájuk a Pauli-féle kizárási elv !

5.1 Az egymástól független elektron közelítés

Ezen közelítésen belül eltekintünk az elektronok között ható elektrosztatikus erőktől és csak az elektronoknak a pozitív töltésű maggal való kölcsönhatását tekintjük. A stacionárius Schrödinger egyenletet tehát csak egy elektronra

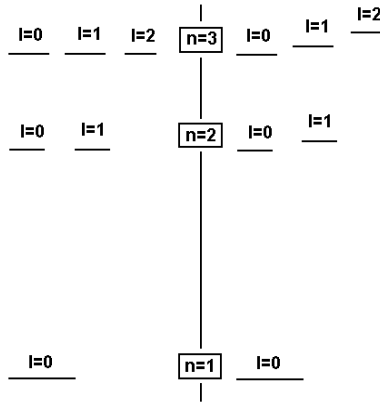


Figure 1: Energiaszintek a független illetve a kvázi-független közelítés szerint

oldjuk meg, a mag Coulomb típusú centrális terében. Az elemi kvantummechanika során a feladatot megoldva láttuk, hogy az orbitális változók terén a H, L^2, L_z mennyiségek egy teljes megfigyelhető mennyiség-rendszert alkottak, és a spinnélküli elektron lehetséges stacionárius tiszta állapotait az n, l, m kvantumszámok jellemezték. A stacionárius tiszta állapotok energiái csak az n főkvantumszám értékétől függtek. Egy adott n főkvantumszámmal jellemzett állapot n^2 -szeresen volt elfajult. Ha figyelembe vesszük az elektron spinjét is ($s = 1/2$) egy plusz kétszeres elfajulást kapunk minden állapotra. Az egymástól független elektron közelítés keretében ha a többielektronos atomokat vizsgáljuk, az elektronoknak a kapott egyrészecske stacionárius állapotokon való elosztását a Pauli elv, és az energia-minimum elv figyelembe vételével végezzük. A többielektronos rendszer hullámfüggvényét meg az egyrészecske hullámfüggvények szorzatának a kiosztott stacionárius állapotokon való szimmetrizálásával kapjuk meg.

5.2 A kvázi-független elektron közelítés

Ezen közelítés keretében figyelembe vesszük az elektronok közötti kölcsönhatást, de ezt sokkalta gyengébbnek tekintjük mint az elektron-mag kölcsönhatást. Az elektron rendszer Hamilton operátora:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \frac{-e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (45)$$

A fenti Hamilton operátorba most az utolsó tagot egy kis perturbációnak tekintjük amit az i elektron esetén a többi elektron által keltett átlagtér ($V'(r_i)$)

hatásaként veszünk figyelembe (ez az úgynevezett átlagtér-közelítés).

$$\sum_i V'(r_i) = \sum_{i < j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (46)$$

Ezzel a közelítéssel mindent tagot be tudunk írni egy összegbe:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{-e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r_i} + V'(r_i) \right) \quad (47)$$

Mivel az elektronok megkülönböztethetetlen részecskék, feltételezhetjük, hogy minden elektronra ugyanaz az átlagtér hat. Ezáltal felbontotjuk a rendszert identikus, egymással nem kölcsönható rendszerekre, amelyek egymástól függetlenül tanulmányozhatók. Egy ilyen rendszer Hamilton operátora

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{-e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r_1} + V'(r_1) \quad (48)$$

és akárcsak az egymástól független elektron közelítésben a (H, L^2, L_z, S_z) mennyiségek egy teljes megfigyelhető rendszert alkotnak. Minden elektron a mag körüli elektrosztatikus térben mozog, de érez még pluszban egy

$$V'(r_i) \ll \frac{-e_i^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r_i} \quad (49)$$

perturbáló potenciált, ami a többi elektron átlagos teréből adódik.

Megoldva ezt a komplikáltabb problémát az eredmény az lesz, hogy a független elektron közelítésben kapott stacionárius szintek elfajulása részben feloldódik. A lehetséges energiaszintek nemcsak az n főkvantumszámtól fognak függni, hanem az l mellék-kvantumszám értékétől is (lásd az 1. ábrát).

A kapott energiaszintek betöltése a minimális energia-kritérium és a Pauli-féle kizárási elveknek megfelelően történik, figyelembe véve az n, l kvantumszámokkal jellemzett szinteknek az m és m_s kvantumszámok szerinti elfajulását. A sorrend:

orbitálok	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p
elektonszám	2	2	6	2	6	2	10	...
spinek	↑↓	↑↓	↑↓↑↓↑↓	↑↓↑↓	↑↓↑↓↑↓	↑↓↑↓	...	...
m=	0	0	-1, 0, 1	0	-1, 0, 1	0	...	...

(50)

A héjak (energiaszintek) feltöltődése megérthető tehát egy perturbációs módszer illetve a Pauli-féle kizárási elv alkalmazásával. Ezáltal első közelítésben megérthető az atomok periódusos rendszere.