1 Symetrie vlnové funkce, bosony a fermiony.

Máme soustavu N interagujících částic. Konečná rychlost interakce způsobuje, že systém závisí na celé své historii. Pro dostatečně pomalé částice (vůči rychlosti šíření interakce-světla) se konfigurace téměř nemění vzhledem k době předávání interakce – přesnost Hamiltoniánu do řádu $(v/c)^2$. Ten pak bude záviset pouze na hybnostech a souřadnicích částic. Hamiltonián pak vypadá:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_1, \ldots, x_N) + W \tag{1}$$

V operátor potenciální energie, W operátor spin-orbitální a spin-spinové interakce + částečný vliv retardace. Jelikož W obsahuje veličiny úměrné $(v/c)^2$, v nerelativistické aproximaci je lze započíst poruchově.

Schrödingerova rovnice

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\Psi = 0 \tag{2}$$

má za řešení vlnovou funkci, která závisí na různých proměnných podle volby reprezentace.

Pro identické částice se H nemění při jejich transpozici P_{kl} – musí spolu komutovat. Komutující operátory s H jsou integrály pohybu. Na příkladu 2 částic – aplikace P_{12} na $\Psi(1,2)$ jednou a dvakrát:

$$P_{12}\Psi(1,2) = \lambda\Psi(1,2) \tag{3}$$

$$P_{12}^2\Psi(1,2) = \lambda^2\Psi(1,2) \tag{4}$$

Z definice transpozice P_{12} ale taky plyne

$$P_{12}\Psi(1,2) = \Psi(2,1) \tag{5}$$

$$P_{12}^2\Psi(1,2) = \Psi(1,2) \tag{6}$$

Operátor transpozice P_{12} má tedy dvě vlastní čísla ± 1 – symetrická/antisymetrická funkce.

Zobecnění pro N částic – symetrie musí zůstat zachovnána pro libovolnou transpozici dvojice. Vyšší symetrie jsou Schrödingerovou rovnicí povoleny, ale v realizují se pouze tyto dvě. Symetrii neporuší ani poruchový operátor částiového působení, neboť působení na stejné částice je vždy symetrické vůči traspozici dvojic.

Druh symetrie (a integrál pohybu) je určen typem částic.

Antisymetrická – fermiony – poločíselný spin: protony, neutrony, elektrony.

Symetrická – bosony – celočíselný spin: α-částice

Ne každá lineární kombinace vlnových funkcí vyhovující Schrödingerově rovnici pro soustavu stejných částice tedy vyjadřuje možný stav – symetrie musí zůstat zachována. To lze zařídit například tak, že se pro systém N stejných částic hledají funkce tvaru

$$\Psi_s = C_s \sum_v P_v \psi(1, \ldots, N) \tag{7}$$

$$\Psi_a = C_a \sum_v (-1)^v P_v \psi(1, \ldots, N) \tag{8}$$

kde suma probíhá všech $N!$ transpozic dvojic P_v.

1.1 Jednočásticový Hamiltonián, sym/antisymetrizace vlnové funkce

QM problémy nelze přesně řešit. Proto se uplatňuje metoda postupných aproximací. V nultém přiblížení se vezmou částice jako nezávislé a interakce se ve vyšších aproximacích započítává poruchově. H soustavy se pak dá zapsat jako součet jednočásticových $H_i(i)$, s vlastními funkcemi $\phi_{n_i}(i)$ (n_i značí soubor kvantových čísel charakterizujících stav i-té částice). Vlastní funkce H pak bude obecně lineární kombinací součinů ϕ_{n_i}; vlastní hodnota H bude součtem vlastních hodnot H_i. Tj.:

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i(i) \ ; \quad [H_i(i) - \epsilon_{n_i}]\phi_{n_i}(i) = 0 \ ; \quad E = \sum_i \epsilon_{n_i} \tag{9}$$

Soustava bosonů musí mít tvar symetrizovaného součinu

$$\Psi_s = C_s \sum_v P_v \phi_{n_1}(1) \ldots \phi_{n_B}(N) \tag{10}$$

Soustava fermionů bude mít tvar antisymetrického součinu

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_v (-1)^v P_v \phi_{n_1}(1) \ldots \phi_{n_B}(N) \tag{11}$$

Který lze vyjádřit i pomocí determinantu (MP: z jeho definice). Tím je zajištěn i **Pauliho princip:** soustava stejných fermionů nemůže být ve stavech popsaných vlnovými funkcemi obsahujícími dva nebo více stejných jednočásticových stavů (determinant nulový). Nebo: v každém jednočásticovém stavu se může nacházet nejvýše jeden fermion. Taková formulace je platná pouze pro slabé interakce, kde lze hovořit o stavech jednotlivých částic. Obecněji: soustava částic splňuje Pauliho princip, jsou-li všechny její stavy popsány pouze vlnovými funkcemi antisymetrickými vzhledem k transpozicím dvojic částic. Tato forma také zajišťuje nerozlišitelnost částic – nelze určit která jednotlivá částice je ve kterém stavu konkrétně.

2 Spinová funkce, Youngova schémata

V nerelativistickém přiblížení a bez magnetického pole je H soustavy stejných částic

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + V(x_1, \ldots, x_N) \tag{12}$$

tedy neobsahuje operátory spinů. Vlnovou funkci lze pak vyjádřit jako součin prostorové části Φ a spinové části χ

$$\Psi(x_1 s_1, \ldots, x_N s_N) = \Phi(x_1 s_1, \ldots, x_N s_N)\chi(x_1 s_1, \ldots, x_N s_N) \tag{13}$$

nebo jako lineární kombinaci takových součnů. Tento tvar se používá dokonce i v případech, kdy H obsahuje operátor spin-orbitální interakce.

Pro Ψ složenou z prostorové i spinové části je danou symetrii (výše) možno dosáhnout několika kombinacemi funkcí Φ a χ, které mají své symetrie vůči permutacím svých proměnných. Pro svou přehlednost se používají **Youngova schémata**, která se kreslí jako různě uspořádaných N čtverců, jejichž počet odpovídá počtu jejich možných rozkladů. Pro $N = 4$ se dá zapsat také takto:

$$[4],\ [3,1],\ [2,2],\ [2,1,1],\ [1,1,1,1] \tag{14}$$

čísla uvádějí počet buněk v každém řádku. Vlnová funkce příslušná danému schématu se získá symetrizací podle proměnných v jednotlivých řádcích (v rámci skupin určených čísly) a antisymetrizací podle proměnných v jednotlivých sloupích (jednotlivých skupin určených čísly), počínaje prvním. [4] tedy opdovídá plně symetrické funkci, kdežto $[1,1,1,1]$ plně antisymetrické. Ostatní schémata odpovídají stavům se smíšenou symetrií.

Jelikož $s = \pm\frac{1}{2}$, spinová funkce χ může být antisymetrizována nejvýše ke dvěma proměnným, což odpovídá schématům s nejvýš dvěma řádky. Pro $N = 4$ to je např.:

$$[4],\ [3,1],\ [2,2] \tag{15}$$

notace tedy vlastně znamená spin $[N\uparrow, N\downarrow]$.

Lze ukázat, že pro soustavy z částic se spinem 1/2 odpovídají jednotlivá schémata (a jejich vln. fce.) stavům s určitou hodnotou celkového spinu. Např. stavy 15 mají celkový spin postupně $S = 2$, 1 a 0. Stav [3] má $S = 3/2$, stav $[2,1]$ má $S = 1/2$ apod.

Youngova shémata pro spinové funkce (max. dvouřádková) charakterizují pouze celkový spin soustavy, každé schéma samostatně reprezentuje $2S + 1$ různých spinových stavů, které se od sebe liší svým průmětem.

Důležitý příklad: α a β jsou spinové stavy svou částic se spinem 1/2. Spinovému schématu $[1,1]$ s celkovým spinem $S = 0$ odpovídá vlnová funkce

$$\chi_a(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \tag{16}$$

Ke schématu [2] s celkovým spinem $S = 1$ odpovídají ale 3 funkce:

$$\chi_{s1}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] \tag{17}$$

$$\chi_{s2}(1,2) = \alpha(1)\alpha(2) \tag{18}$$

$$\chi_{s3}(1,2) = \beta(1)\beta(2) \tag{19}$$

Každému spinovému stavu soustavy N částic (schématu pro χ) lze tedy přiřadit taková prostorová funkce Φ, aby celková funkce byla antisymetrická (pro fermiony) vzhledem k transpozicím souřadnic i spinů. Obecně lze ukázat, že celková Ψ bude antisymetrická tehdy, jestliže spinovou χ (odpovídající přípustnému schématu) přenásobíme prostorovou Φ, která odpovídá transponovanému schématu. Pro $N = 4$ např.:

$$\Psi_2 = \Phi[1,1,1,1] \quad \chi[4] \tag{20}$$

$$\Psi_1 = \Phi[2,1,1] \quad \chi[3,1] \tag{21}$$

$$\Psi_0 = \Phi[2,2] \quad \chi[2,2] \tag{22}$$

Částice s poločíselným spinem $s > 1/2$ přísluší schématům s nejvýše $2s + 1$ řádky. V těchto případech není celkový spin soustavy více než dvou částic určen obecně jednoznačně Youngovým schématem spinové funkce.

Vlnové funkce částic s celočíselným spinem musí být symetrické, jsou tudíž vyjádřeny lineárními kombinacemi součinů prostorové a spinové funkce, které přísluší témuž schématu.

Vše přebráno z Davydova.