

## VI. SOUSTAVY STEJNÝCH ČÁSTIC

V kap. IV jsme uvedli základní postuláty nerelativistické kvantové mechaniky částic a v kap. V jsme je doplnili postulováním spinu částic. Nyní ukážeme, že ani potom ještě není soubor postulátů dostačující, jestliže bychom ho aplikovali na úlohy spojené se soustavami stejných částic; dostávali bychom totiž nejednoznačné předpovědi o chování studované soustavy. Na rozdíl od předcházející kapitoly, provedeme podstatnou část výkladu v obvyklé souřadnicové reprezentaci a až v závěru se stručně zmíníme o reprezentaci obsazovacích čísel, která je pro tuto oblast kvantové mechaniky mnohem vhodnější.

### 1. Problém stejných částic

#### 1.1) Nerozlišitelnost identických mikročástic

Dvě částice jsou identické, jestliže všechny jejich vnitřní charakteristiky (hmotnost, náboj, spin atd) jsou přesně stejné a žádný experiment nemůže tyto částice rozlišit. Tak např. všechny elektrony ve vesmíru jsou identické, stejně jako třeba všechny protony nebo vodíkové atomy. Na rozdíl od klasické mechaniky, má nerozlišitelnost identických mikročástic fundamentální důsledky v chování souborů z těchto částic a tedy i v aparátu kvantové mechaniky.

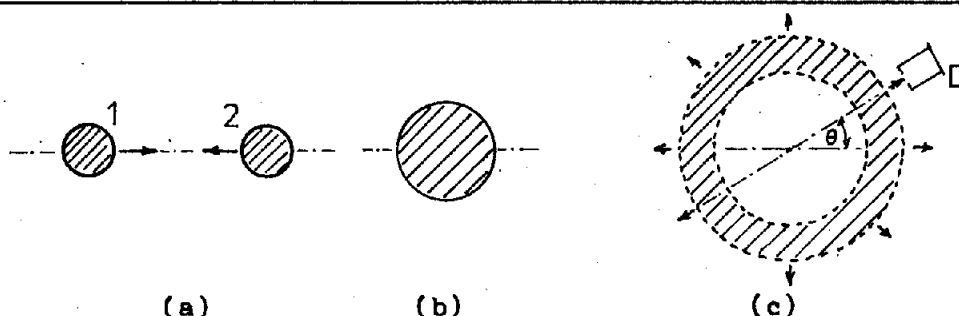
V klasické mechanice se předpokládá ( i když víceméně implicitně), že sledované částice lze vždy rozlišovat, aniž by to nějak měnilo dynamický stav soustavy těchto částic. Tak např. kulečnickové koule lze rozlišit barvou nebo napsanými čísly a přitom nic nezměnit na jejich pohybu. A i když tento "primitivní" způsob rozlišení není možný (např u hmotných bodů, což je základní abstrakce s níž klasická mechanika pracuje), vždy zde zbývá možnost rozlišovat částice podle jejich trajektorie. Každá částice má totiž svou spojitou a z Newtonových rovnic jednoznačně určenou trajektorii ( spojité křivka v matematickém slova smyslu); podle toho, že v daném časovém okamžiku se nachází částice v určitém bodě některé trajektorie, můžeme vždy rozhodnout o kterou částici jde.

V kvantové mechanice však i tato poslední a principiální možnost mizí. Příčiny by měly vyplynout ze závěrů v kap.II. Doplníme si je ještě následující úvahou o rozptylu dvou mikročástic.

Z hlediska klasické mechaniky je stav (souřadnice + impuls) každé z částic v čase  $t=0$  určen počátečními podmínkami. Částice se pohybují po přesně určených trajektoriích, v nějakém bodě prostoru se srazí (interagují) a pohybují se dále po jednoznačně určených drahách. Z počátečních podmínek a zadaného silového působení mezi částicemi, se dá z Newtonových

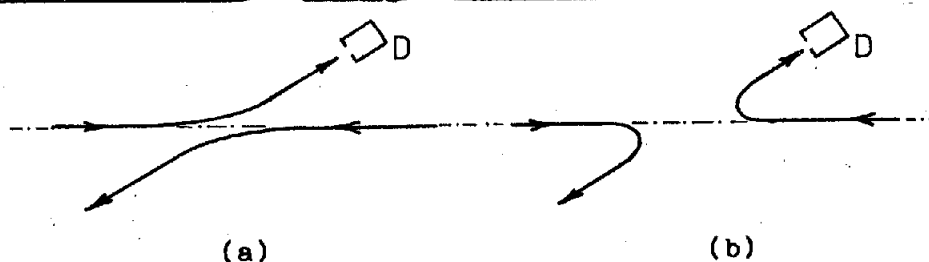
rovníc určit trajektorie každé z částic a podle toho na které trajektorii se částice nachází, je možné v každém okamžiku určit o kterou z nich jde.

Zcela jinak probíhá srážka dvou mikročástic. Předpokládejme, že před srážkou jsme měli částice reprezentované dvěma zcela separovanými vlnovými klubky, která se pohybovala ( v souřadné soustavě spojené s těžištěm částic) proti sobě. Pro určitost říkejme, že zleva přichází částice 1 a zprava částice 2 (obr.65a). Během srážky dojde k překrytí klubek (obr.65b).



Obr. 65. Srážka dvou identických mikročástic v souřadné soustavě spojené s těžištěm. Před srážkou (a) jsou částice zcela separované. Během srážky (b) dojde k překrytí vlnových klubek. Po srážce (c) je pravděpodobnost nalezení částice nenulová v kulové vrstvě, jejíž poloměr se s časem zvětšuje. Protože částice jsou identické, nemůžeme rozhodnout, kterou z nich registroval detektor D.

Po srážce (obr.65c) je nenulová pravděpodobnost nalézt částici v kulové vrstvě, jejíž poloměr se s časem zvětšuje. Jestliže detektor D, umístěný ve směru určeném úhlem  $\theta$  (vzhledem k počátečním rychlostem částic) registruje částici, znamená to, že druhá z částic se musí (vzhledem k zachování impulsu) pohybovat v opačném směru. Není však možné rozhodnout, zda detektor registroval částici původně označenou 1 nebo 2. Není tedy možné rozhodnout, která ze dvou alternativ na obr. 66 se realizovala.



Obr. 66. Schematické znázornění dvou možných "drah" při srážce dvou identických částic (obr.65); není principiálně možné rozhodnout, která z nich se realizovala.

Jestliže bychom nyní aplikovali postuláty z kap.IV, dostali bychom se do obtíží; k určení pravděpodobnosti výsledku měření je totiž nutné znát stavový vektor, který odpovídá výsledku měření. Zde však máme dva podle obr.66; ket-vektory pro obr.66a a 66b jsou různé (a dokonce ortogonální).

Přesto jim z hlediska měření odpovídá jediný fyzikální stav, neboť nelze postavit takový experiment, který by je ještě navíc rozlišil. Máme tedy pravděpodobnost výsledku počítat užitím obr.66a,66b nebo obou? Jestliže se vezmou oba stavy, mají se sečítat pravděpodobnosti nebo amplitudy pravděpodobnosti (a s jakým znaménkem?) ?

Jako další příklad si ještě uveďme soustavu tvořenou dvěma vodíkovými atomy. Jsou-li atomy tak vzdálené, že se vlnové funkce nepřekrývají, potom je každý z elektronů prakticky lokalizován u svého jádra. S přibližováním atomů roste oblast překrytí vlnových funkcí, tj. oblast, v níž je možné nalézt oba elektrony. Jestliže výsledkem experimentu je zjištění, že v této oblasti je elektron, neexistuje už způsob dovolující rozhodnout, který z obou elektronů to je.

Uvedené příklady ukazují, že identita kvantových částic má mnohem hlubší podstatu než u klasických částic; na rozdíl od klasicky pojímaných částic jsou identické mikročástice nejen ve všem všudy stejné, ale i nerozlišitelné. Tato skutečnost musí být zabudována do aparátu kvantové mechaniky a důsledkem toho musí být i úplné odstranění výše zmíněných nejednoznačností v předvídání výsledků měření.

## 1.2) Symetrické a antisymetrické stavy

Mějme soustavu tvořenou dvěma částicemi, např. dva elektrony v elektronovém obalu atomu He. Vlnová funkce této soustavy bude záviset na polohových vektorech obou elektronů  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  (spinovou proměnnou zatím pro jednoduchost nebudeme uvažovat) tj.  $\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$ . Kdyby částice byly rozlišitelné, potom by výraz (viz odst. II.3.3)

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2 dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \quad (1)$$

udával pravděpodobnost, že v čase  $t$  najdeme 1.částici v infinitesimálním objemu  $dx_1 dy_1 dz_1$  opsaném kolem bodu  $\vec{r}_1$  a současně 2.částici v objemu  $dx_2 dy_2 dz_2$  opsaném kolem bodu  $\vec{r}_2$ . Jsou-li částice nerozlišitelné, můžeme pouze tvrdit, že výraz (1) udává pravděpodobnost, že v čase  $t$  najdeme jednu z částic (nevíme která to je) v objemu  $dx_1 dy_1 dz_1$  v okolí  $\vec{r}_1$  a současně druhou z nich v okolí  $dx_2 dy_2 dz_2$  bodu  $\vec{r}_2$ . Matematicky vyjádřeno to znamená, že výraz pro hustotu pravděpodobnosti  $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2$  se nesmí změnit (musí být invariantní) při záměně souřadnic, tj. musí být

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1; t)|^2 \quad (2)$$

Pro samotnou vlnovou funkci to znamená, že

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \pm \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1; t) \quad (3)$$

Důkaz provedeme současně se zobecněním na soustavu  $N$  nerozlišitelných mikročástic se spinem.

Mějme soustavu  $N$  stejných částic. Vlnová funkce takové soustavy má tvar

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) \quad (4)$$

kde  $\xi_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) značí prostorovou souřadnici (polohový vektor)  $\vec{r}_i$  + spinovou proměnnou  $\sigma_i$   $i$ -té částice.

Zaměníme-li v soustavě  $i$ -tou a  $k$ -tou částici, potom vzhledem k nerozlišitelnosti částic se nemůže změnit stav soustavy. Záměna částic se v (4) projeví vzájemnou výměnou souřadnic  $\xi_i, \xi_k$ ; jestliže se stav nezměnil, musí, vzhledem k pravděpodobnostní interpretaci vlnové funkce, platit

$$|\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t)|^2 = |\psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N; t)|^2 \quad (5)$$

Samotná vlnová funkce se tedy mohla změnit jen o nepodstatný fázový faktor s modulem 1, tj.

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N; t) = e^{i\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) \quad (6)$$

kde  $\alpha$  je nějaké reálné číslo.

Provedeme-li znovu záměnu  $i$ -té a  $k$ -té částice, vrátíme se do výchozího stavu. Musí tedy platit

$$\begin{aligned} \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) &= e^{i\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N; t) = \\ &= e^{i2\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N; t) \end{aligned} \quad (7)$$

Odtud však plyne, že musí být  $\exp(i2\alpha) = 1$  a tedy

$$e^{i\alpha} = \pm 1 \quad (8)$$

Vlnová funkce soustavy identických částic tudíž musí při záměně souřadnic libovolných dvou částic buď

(a) zůstat nezměněna - potom se říká, že je symetrická nebo

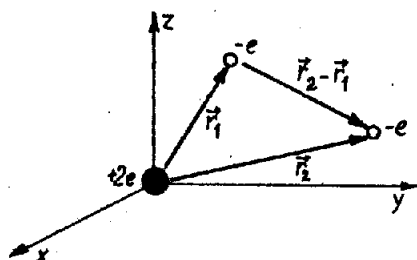
(b) změnit jen znaménko - potom se říká, že je antisymetrická.

Jedině funkce, které mají tuto vlastnost, mohou reprezentovat reálný (možný) stav soustavy částic; v přírodě se realizují jen stavy se symetrickými nebo antisymetrickými vlnovými funkcemi.

Experiment ukazuje, že soustavám tvořeným elektrony, protony, neutrony je nutné vždy přiřazovat funkci antisymetrickou. Naproti tomu např. soustavě  $\alpha$ -částic je třeba vždy přiřazovat funkci symetrickou.

Zatímco vlnová funkce soustavy stejných částic může při transpozici dvou libovolných souřadnic změnit znaménko (je-li antisymetrická), hamiltonián soustavy stejných částic musí být zřejmě vždy invariantní (nesmí se měnit) k záměně libovolné dvojice souřadnic; hamiltonián totiž reprezentuje celkovou energii soustavy a ta se nemůže změnit, jestliže se v ní zamění dvě identické částice.

Pro ilustraci si napíšeme třeba hamiltonián již zmíněného souboru dvou elektronů v poli heliového jádra s nábojem  $+2e$  (jádro předpokládáme nepohyblivé v počátku souřadnic; obr.67)



Obr. 67.

Dva elektrony s nábojem  $-e$  v poli heliového jádra s nábojem  $+2e$  (předpokládá se nepohyblivé jádro v počátku souřadnic);

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i) \quad (i=1,2).$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\vec{r}_2} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1|} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_2|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (9)$$

$$\text{kde} \quad -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\vec{r}_i} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right)$$

je operátor kinetické energie  $i$ -tého ( $i=1,2$ ) elektronu,

$$-\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i|} \quad \text{je operátor potenciální energie } i\text{-tého elektronu}$$

v poli jádra ( v soustavě SI) a

$$+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad \text{je operátor potenciální energie vzájemné}$$

(elektron-elektronové) interakce elektronů.

Existenci spinu jsme v (9) zatím nevzali v úvahu. Záměna souřadnic  $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2$  změni v (9) jen pořadí sčítanců.

Z invariance hamiltoniánu souboru stejných částic, vzhledem k transpozici libovolných dvou souřadnic, vyplývá významný důsledek: symetrie vlnových funkcí se nemůže s časem, ani vlivem vnějších polí, změnit.

Jinými slovy: přísluší-li souboru částic funkce symetrická (antisymetrická), potom zůstává stále symetrickou (antisymetrickou), bez ohledu na to, do jakých polí se soustava dostává. Důkaz tohoto tvrzení najdete např. v [11 - 13].

Získané závěry shrneme do postulátu, který pro soubory stejných částic doplní postuláty z kap. IV.

Stavový vektor souboru stejných částic musí být, v závislosti na druhu částic, buď symetrický nebo antisymetrický, vzhledem k transpozici souřadnic libovolné dvojice částic souboru.

Antisymetrické vlnové funkce přísluší soustavám částic s polovinovým spinem ( $\hbar/2, 3\hbar/2, 5\hbar/2, \dots$ ) a symetrické vlnové funkce částicím s celočíselným spinem ( $0, \hbar, 2\hbar, \dots$ ).

Zdánlivě jemný rozdíl (symetrie nebo antisymetrie) ve vlastnostech vlnových funkcí souborů stejných částic, má dalekosáhlé důsledky v chování souborů stejných částic. Projeví se to markantně např. ve statistice, již se tyto soubory řídí; odtud také pochází název bosony pro částice se symetrickou vlnovou funkcí (řídí se Boseho-Einsteinovou statistikou) a název fermiony pro částice s antisymetrickou vlnovou funkcí (řídí se Fermiho-Diracovou statistikou).

Zřejmě všechny částice, které se vyskytují v přírodě, musí být buď bosony nebo fermiony; jiná možnost není. Známe-li zařazení do těchto skupin u tzv. elementárních částic (kromě fotonu se spinem 0 jsou všechny ostatní běžné částice fermiony se spinem  $\hbar/2$ ), potom zařazení složených částic (např. zmíněná heliová jádra =  $\alpha$ -částice) je určováno výsledným spinovým momentem.

Závěrem znovu zdůrazněme: požadavek symetrie nebo antisymetrie vlnových funkcí je vyjádřením principu nerozlišitelnosti stejných částic.

### 1.3) Jak najít symetrické a antisymetrické vlnové funkce

Vlnová funkce, kterou najdeme řešením Schrödingerovy rovnice, nemusí být ani symetrická, ani antisymetrická (přesto však je řešením Schrödingerovy rovnice). Co dělat v takovém případě? Ukažme nejdříve postup na vlnové funkci pro dvě částice (např. řešení Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem (9)). Pro jednoduchost zápisu nahradíme  $\xi_1 \rightarrow 1, \xi_2 \rightarrow 2$ , takže vlnovou funkci  $\psi(\xi_1, \xi_2)$  budeme stručně psát  $\psi(1,2)$ .

Je-li  $\psi(1,2)$  řešením Schrödingerovy rovnice, potom jím je také funkce  $\psi(2,1)$  (tj. funkce  $\psi(\xi_2, \xi_1)$  získaná záměnou  $\xi_1, \xi_2$ ), neboť, jak jsme ukázali, hamiltonián je invariantní k záměně souřadnic, tj.

$$\mathcal{H}(1,2) = \mathcal{H}(2,1).$$

Platí tedy (pro jednoduchost uvažujeme jen stacionární Schrödingerovu rovnici)

$$\mathcal{H} \psi(1,2) = E \psi(1,2), \quad \mathcal{H} \psi(2,1) = E \psi(2,1) \quad (10)$$

V tomto místě je třeba zdůraznit toto: jestliže  $\psi(1,2)$  není lineárně závislá s  $\psi(2,1)$  a přitom  $\psi(1,2), \psi(2,1)$  nejsou symetrické ani antisymetrické, potom (10) nevyjadřuje degeneraci hladiny s energií  $E$ ! Podle přijatého postulátu totiž  $\psi(1,2)$  a  $\psi(2,1)$  nerepresentují reálné (možné) stavy souboru. To dělají jen funkce symetrické nebo antisymetrické, které z nich získáme.

Jsou-li  $\psi(1,2), \psi(2,1)$  řešením Schrödingerovy rovnice pro tutéž vlastní hodnotu  $E$ , potom také každá jejich lineární kombinace

$$\Psi(1,2) = c_1 \psi(1,2) + c_2 \psi(2,1) \quad (11)$$

je řešením Schrödingerovy rovnice s vlastní hodnotou E. Koeficienty  $c_1, c_2$  tedy můžeme vybrat tak, aby výsledná funkce  $\Psi(1,2)$  již byla symetrická nebo antisymetrická.

Funkci symetrickou -  $\Psi^{(s)}(1,2)$  - dostaneme pro  $c_1 = c_2 = 1$ ,

funkci antisymetrickou -  $\Psi^{(a)}(1,2)$  - dostaneme pro  $c_1 = -c_2 = 1$ :

$$\Psi^{(s)}(1,2) = \psi(1,2) + \psi(2,1) \quad (12a)$$

$$\Psi^{(a)}(1,2) = \psi(1,2) - \psi(2,1) \quad (12b)$$

Nyní již platí  $\Psi^{(s)}(1,2) = \Psi^{(s)}(2,1)$  a  $\Psi^{(a)}(1,2) = -\Psi^{(a)}(2,1)$ .

Tento postup můžeme snadno zobecnit i na funkce (4).

Nechť  $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$  je řešením stacionární Schrödingerovy rovnice s energií E

$$\mathcal{H}(\xi_1, \dots, \xi_N) \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = E \psi(\xi_1, \dots, \xi_N) \quad (13)$$

Není-li  $\psi$  ani symetrická ani antisymetrická, získáme z ní

symetrickou funkci  $\Psi^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$  takto: v  $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N)$  provedeme všechny možné transpozice dvojic souřadnic, čímž dostaneme  $N!$  funkcí

$$\psi(\xi_{P1}, \xi_{P2}, \dots, \xi_{PN}) \quad (14)$$

kde  $(P1, P2, \dots, PN)$  označuje nějakou permutaci z čísel  $(1, 2, \dots, N)$ .

Např. pro 3 částice by to bylo  $3! = 6$  funkcí (zápis  $\xi_i = i$  ( $i=1, 2, 3$ )):

$$\psi(1, 2, 3), \psi(2, 1, 3), \psi(3, 2, 1), \psi(2, 3, 1), \psi(1, 3, 2), \psi(3, 1, 2).$$

Symetrickou vlnovou funkcí dostaneme sečtením všech  $N!$  funkcí (14), tj

$$\Psi^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_P \psi(\xi_{P1}, \xi_{P2}, \dots, \xi_{PN}) \quad (15)$$

kde  $(P1, P2, \dots, PN)$  je jedna z  $N!$  možných permutací čísel  $(1, 2, \dots)$  a součet se provádí přes všechny možné permutace P.

Abychom získali z funkcí (14) funkci antisymetrickou

$\Psi^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$ , rozdělíme soubor funkcí (14) na dvě poloviny po

$N!/2$  členech. Do jedné skupiny zařadíme funkce pro něž je  $(P1, P2, \dots, PN)$  sudou permutací a do druhé ty, pro něž je  $(P1, P2, \dots, PN)$  lichou permutací. Připomeňme si ze základů algebry, že permutace  $(P1, P2, \dots, PN)$  se nazývá sudá(lichá), jestliže se ze základního uspořádání  $(1, 2, \dots, N)$  získá sudým(lichým) počtem transpozic dvojic čísel. Tak např. z  $(1, 2, 3, 4)$  se permutace  $(2, 3, 1, 4)$  získá sudým počtem transpozic a permutace  $(2, 4, 1, 3)$  lichým počtem transpozic. V algebře se dokazuje, že zařazení do jedné z těchto skupin je určeno jednoznačně.

Vezmeme-li nyní do lineární kombinace jednu skupinu ( $N!/2$  funkcí) se znaménkem (+) (s koeficientem +1) a druhou se znaménkem (-) (s koeficientem -1) bude získaná funkce

$$\Psi^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_P (-1)^T \psi(\xi_{P1}, \xi_{P2}, \dots, \xi_{PN}) \quad (16)$$

(kde  $T$  udává počet transpozic) antisymetrická. Zaměníme-li totiž v  $\Psi^{(a)}$  dvě souřadnice, projeví se to na pravé straně (16) přidáním jedné transpozice do všech sčítanců; ty které byly původně získány sudým počtem transpozic, budou nyní odpovídat lichému počtu transpozic a opačně. Výsledkem je jen změna znaménka u  $\Psi^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N)$ .

## 2. Soubory neinteragujících stejných částic. Pauliho princip

Přesné kvantověmechanické řešení problému mnoha částic naráží na nepřekonatelné matematické obtíže. Proto je nutné se téměř vždy obracet k přibližnému řešení (později poznáte, že např. podstatná část učebnic kvantové chemie je věnována rozvíjení přibližných metod pro řešení Schrödingerovy rovnice pro atomy a molekuly). Nejběžnější aproximací, jejíž vznik spadá až do počátků kvantové mechaniky, je tzv. jednočásticová aproximace, v níž se problém  $N$  částic nahrazuje  $N$  jednočásticovými problémy. K tomu je třeba převést hamiltonián na tvar

$$\mathcal{H}(\xi_1, \dots, \xi_N) = h_1(\xi_1) + h_2(\xi_2) + \dots + h_N(\xi_N) = \sum_{i=1}^N h_i(\xi_i) \quad (17)$$

kde  $h_i(\xi_i)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) je operátor působící pouze na proměnnou  $\xi_i \equiv (x_i, y_i, z_i, \sigma_i)$ .

Tím, jak se taková transformace (aproximativně) provede, se budeme zabývat v II.dílu, v souvislosti s Hartreeho a Hartreeho-Fokovou aproximací. Nejprostší, ale také nejhrubší, způsob jak dosáhnout toho, aby hamiltonián soustavy částic měl strukturu (17), je zanedbat vzájemnou interakci částic; tak např. v (9) to znamená zanedbat elektron-elektronovou interakci (poslední člen v (9)).

Předpokládejme tedy, že hamiltonián soustavy má tvar (17). V Schrödingerově rovnici

$$\mathcal{H} \Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = E \Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) \quad (18)$$

je pak možné separovat proměnné (setkali jsme se s tím již např. v odst. III.1.3), tj hledat vlnovou funkci  $\Psi$  ve tvaru součinu

$$\Psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi^{(1)}(\xi_1) \psi^{(2)}(\xi_2) \dots \psi^{(N)}(\xi_N) \quad (19)$$



kde  $\psi^{(i)}(\xi_i)$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) je funkce závislá jen na souřadnicích  $i$ -té částice.

Dosažením do Schrödingerovy rovnice (18), dostaneme

$$\sum_{i=1}^N \psi^{(1)}(\xi_1) \dots \psi^{(i-1)}(\xi_{i-1}) \psi^{(i+1)}(\xi_{i+1}) \dots \psi^{(N)}(\xi_N) h_i(\xi_i) \psi^{(i)}(\xi_i) =$$

$$= E \psi^{(1)}(\xi_1) \dots \psi^{(i)}(\xi_i) \dots \psi^{(N)}(\xi_N) \quad (20)$$

Po vydělení obou stran součinem funkcí (19) máme

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{\psi^{(i)}(\xi_i)} h_i(\xi_i) \psi^{(i)}(\xi_i) = E \quad (21)$$

Pravou stranou rovnice (21) je konstanta. Levá strana je součtem členů, z nichž každý závisí pouze na jedné z proměnných  $\xi_1, \dots, \xi_N$ . Aby platila rovnost (21) pro všechny možné hodnoty proměnných  $\xi_1, \dots, \xi_N$ , musí platit

$$h_i(\xi_i) \psi^{(i)}(\xi_i) = \varepsilon^{(i)} \psi^{(i)}(\xi_i) \quad (22a)$$

$$\varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \dots + \varepsilon^{(N)} = E \quad (22b)$$

Získané výsledky mají jednoduchý fyzikální smysl. Rovnice (22a) je stacionární Schrödingerova rovnice pro  $i$ -tou částici; výraz (22b) vyjadřuje triviální fakt, že celková energie  $E$  souboru nezávislých částic je rovna součtu energií jednotlivých částic souboru.

Jde-li o soubor  $N$  nerozlišitelných částic, potom rovnice (22a) bude pro všechny částice stejná, takže můžeme vypustit index ( $i$ ) a psát

$$h(\xi) \psi(\xi) = \varepsilon \psi(\xi) \quad (23)$$

Její řešení je množina

$$\text{vlastních funkcí: } \psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \dots, \psi_k(\xi), \dots \quad (24)$$

a

$$\text{vlastních hodnot: } \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k, \dots$$

V souboru  $N$  stejných neinteragujících částic bude každá z částic v některém ze stavů (24); nechť

1. částice	je ve stavu	$\psi_{k_1}(\xi)$	s energií	$\varepsilon_{k_1}$	
2. částice	- " -	$\psi_{k_2}(\xi)$	- " -	$\varepsilon_{k_2}$	
$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	
$i$ -tá částice	- " -	$\psi_{k_i}(\xi)$	- " -	$\varepsilon_{k_i}$	
$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	
$N$ -tá částice	- " -	$\psi_{k_N}(\xi)$	- " -	$\varepsilon_{k_N}$	(25)

kde  $k_i$  je soubor kvantových čísel určujících stav  $i$ -té částice ( $i=1,\dots,N$ ).

Stav celé soustavy je potom určen souborem kvantových čísel  
 $k_1, k_2, \dots, k_N$ .

Vlnová funkce (19) pro takový stav je

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2) \dots \psi_{k_N}(\xi_N) \quad (26a)$$

a celková energie souboru částic v tomto stavu je

$$E_{k_1, k_2, \dots, k_N} = \varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \dots + \varepsilon_{k_N} \quad (26b)$$

Funkce (26a) je vlastní funkcí hamiltoniánu  $\mathcal{H}$ , není však obecně (pro libovolné hodnoty  $k_1, \dots, k_N$ ) ani symetrická, ani antisymetrická. Funkce, které by tuto vlastnost měly a příslušely tedy stavům, které se v přírodě realizují, z ní můžeme získat postupem uvedeným v odst. 1.3.

Podle (15) bude funkce symetrická

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \psi_{k_1}(\xi_{P1}) \psi_{k_2}(\xi_{P2}) \dots \psi_{k_N}(\xi_N) \quad (27a)$$

Stejně dobře ovšem můžeme dělat permutace v souboru kvantových čísel  $(k_1, \dots, k_N)$ , takže také

$$\Psi_{k_1, \dots, k_N}^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \psi_{Pk_1}(\xi_1) \psi_{Pk_2}(\xi_2) \dots \psi_{Pk_N}(\xi_N) \quad (27b)$$

kde  $\sum_P$  značí opět součet přes všech  $N!$  permutací z čísel  $(1, 2, \dots, N)$  v (7a) nebo z čísel  $(k_1, k_2, \dots, k_N)$  v (27b). Koeficient  $1/\sqrt{N!}$  normuje funkci  $\Psi$ , jestliže všechny jednočásticové funkce (24) byly normalizované.

Funkce antisymetrická se získá obdobně podle (16). Vzpomeneme-li si ale na definici determinantu (viz. dod. A), zjistíme, že funkci (16), v níž by na pravé straně vystupovaly součiny (26a), můžeme s výhodou zapsat takto

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}^{(a)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\xi_1) & \psi_{k_2}(\xi_1) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_1) \\ \psi_{k_1}(\xi_2) & \psi_{k_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{k_1}(\xi_N) & \psi_{k_2}(\xi_N) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (28)$$

Rozvedením tohoto tzv. Slaterova determinantu získáme výsledek identický s formulí (16).

Ze zápisu  $\Psi^{(a)}$  ve tvaru determinantu bezprostředně vyplývá známý Pauliho princip, který W. Pauli odvodil, na základě analýzy experimentálních dat, ještě před vznikem kvantové mechaniky; jeho běžná formulace je:

v soustavě stejných fermionů nemohou být dvě nebo více částic v témže kvantovém stavu.

Stav částice je zadán úplným souborem kvantových čísel (odst. IV.3.3); např. stav elektronu v atomu vodíku je určen čísly  $(n, l, m_l, m_s)$ , stav nelokalizované volné částice (s přesně zadaným impulsem) je určen složkami impulsu a spinem  $(p_x, p_y, p_z, m_s)$  apod. V našem obecném značení představují úplné soubory kvantových čísel čísla  $k_1, k_2, \dots, k_N$ . Jestliže by byly dvě (nebo více) částic v témže kvantovém stavu, potom by příslušné sloupce v determinantu byly stejné (např. pro  $k_1 = k_2$  by to byly dva první sloupce) a jak je známo z algebry, determinant se dvěma nebo více sloupci (řádky) stejnými je roven nule. Je-li  $\Psi^{(a)} \equiv 0$ , je i pravděpodobnost realizace (rovná  $|\Psi^{(a)}|^2$ ) takového stavu nulová, což je právě tvrzení Pauliho principu.

Z toho, že i determinant se dvěma nebo více shodnými řádky je roven nule, vyplývá druhá, sice méně častá, ale pro aplikace užitečná, formulace Pauliho principu :

v soustavě stejných fermionů nemohou mít dvě nebo více částic všechny souřadnice shodné.

Zde je pochopitelně opět míněn úplný soubor souřadnic, tj. včetně spinové proměnné.

Pro soubory stejných bosonů žádná omezení, podobná Pauliho principu, neexistují. Symetrická vlnová funkce (27) dává nenulovou pravděpodobnost realizace stavů s libovolnými počty částic v jednotlivých jednočásticových stavech (24).

Výrazný rozdíl mezi bosony a fermiony se projeví již v základním stavu souboru. Předpokládejme, že vlastní hodnoty jednočásticového hamiltoniánu (viz (24)) jsou uspořádány tak, že platí

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots < \varepsilon_i < \dots \quad (29a)$$

Potom základním stavem (stavem s nejnižší energií) souboru  $N$  bosonů bude stav, v němž  $k_1 = k_2 = \dots = k_N = 1$ , tj. stav s vlnovou funkcí

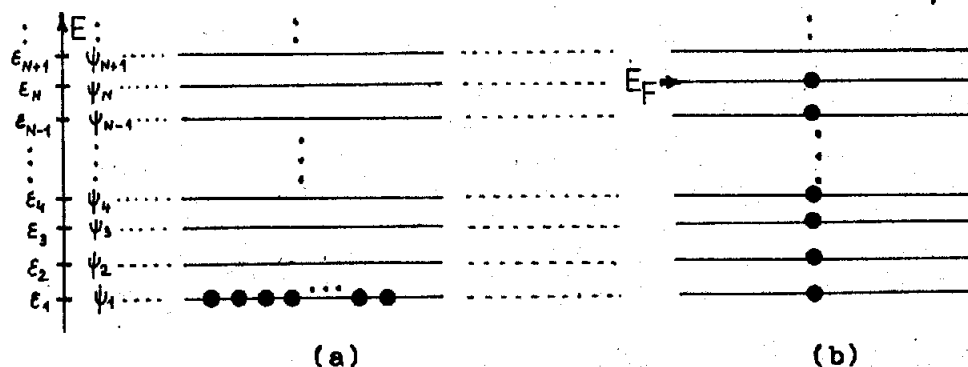
$$\Psi_{1,1,\dots,1}^{(s)}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \psi_1(\xi_1) \psi_1(\xi_2) \dots \psi_1(\xi_N) \quad (30a)$$

a energií

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_1 = N \varepsilon_1 \quad (30b)$$

Všechny bosony jsou v jednočásticovém stavu  $\psi_1(\xi)$  s energií  $\varepsilon_1$  (obr. 68).

Diametrálně odlišný je základní stav souboru  $N$  fermionů. Zde již není možné aby všechny fermiony byly ve stavu  $\psi_1(\xi)$ ; v souladu s Pauliho principem se rozmístí na  $N$  nejnižších hladin  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$ .



Obr. 68. Obsazení jednočásticových hladin (a) bosony, (b) fermiony v základním stavu. Fermiony (b) obsadí všechny hladiny pod Fermiho hladinou s energií  $E_F$ .

Celková energie souboru fermionů v základním stavu potom je

$$E = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \dots + \epsilon_N \quad (31a)$$

a odpovídající normalizovaná (předpokládáme normalizaci jednočásticových funkcí (24)) vlnová funkce je

$$\Psi_{1,2,\dots,N}^{(a)}(\xi_1,\dots,\xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_2(\xi_1) & \dots & \psi_N(\xi_1) \\ \psi_1(\xi_2) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_1(\xi_N) & \psi_2(\xi_N) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (31b)$$

Energie, která přísluší nejvyšší obsazené hladině v základním stavu, (v našem případě  $\epsilon_N$ ), se nazývá Fermiho energie.

Častý případ je, že hladiny  $\epsilon_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) jsou degenerované; místo (29a) bychom pak měli uspořádání

$$\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \epsilon_3 \leq \dots \leq \epsilon_i \leq \dots$$

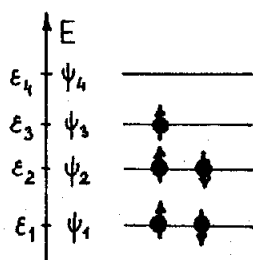
Logičtější potom ovšem je označení, které jsme užívali již v kap. IV:

$$\epsilon_1^{(g_1)} < \epsilon_2^{(g_2)} < \dots < \epsilon_i^{(g_i)} < \dots \quad (29b)$$

kde  $g_i$  značí stupeň degenerace hladiny s energií  $\epsilon_i$ . Na hladině  $\epsilon_i^{(g_i)}$  se pak může v souladu s Pauliho principem umístit  $g_i$  fermionů.

Nejběžnější je případ degenerace vzhledem ke spinu, který nastane když energie soustavy elektronů nezávisí na orientaci spinu. Potom na každou hladinu  $\epsilon_i$  mohou být umístěny 2 elektrony s opačně orientovanými spiny (obr.69).

Z pověděného je zřejmé, že Pauliho princip hraje významnou roli ve všech oblastech fyziky, v nichž se vyskytují soubory mnoha elektronů



Obr. 69.

Rozmístění pěti elektronů na energiové hladiny dvojnásobně degenerované vzhledem ke spinu ( energie částice nezávisí na orientaci spinu ).

(atomy, molekuly, pevné látky apod) nebo soubory mnoha protonů a neutronů (např. jaderná fyzika). Nejběžnější ( a také nejstarší ) je zajisté aplikace Pauliho principu na objasnění výstavby elektronového obalu atomů. Musíme si uvědomit, že existující pestrá škála vlastností atomů (projevující se markantně např. tím, že dva atomy lišící se pouze o jeden elektron, mají diametrálně odlišné chemické vlastnosti) je výsledkem rozmístění elektronů na energiové hladiny podle obr. 68b, 69. Atomy, které by v základním stavu měly všechny elektrony na nejnižší hladině (obr. 68a), by se musely lišit svými vlastnostmi (zvláště při blízkých atomových číslech) nepatrně.

### 3. Soustava dvou stejných částic se spinem 1/2

Vzhledem k mnoha aplikacím je vhodné si podrobněji všimnout vlnové funkce soustavy, která je tvořena dvěma stejnými částicemi (fermiony) se spinem 1/2, např. dvěma elektrony nebo protony.

Úplná vlnová funkce takové soustavy

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) \quad (32)$$

závisí na prostorových (  $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ ,  $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$  ) a spinových (  $\sigma_1, \sigma_2$  ) souřadnicích obou částic.

Za předpokladu, že soustava není ve vnějším magnetickém poli a interakce mezi oběma částicemi nezávisí na orientaci jejich spinů (viz např. interakční člen v (9)), nezávisí hamiltonián na spinových proměnných, takže

$$\mathcal{H}(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \mathcal{H}_r(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \mathcal{H}_s(\sigma_1, \sigma_2) \quad (33)$$

kde operátor  $\mathcal{H}_s(\sigma_1, \sigma_2) = 0$ .

Hamiltonián s touto strukturou vždy umožňuje separovat ve vlnové funkci  $\vec{r}$ - a  $\sigma$ - proměnné, tzn psát

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \cdot X(\sigma_1, \sigma_2) \quad (34)$$

Prostorová část vlnové funkce -  $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  - se určí řešením Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem  $\mathcal{H}_r(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  (příkladem je třeba (9))

$$\mathcal{H}_r(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (35)$$

Spinová část vlnové funkce -  $X(\sigma_1, \sigma_2)$  - je pro  $\mathcal{H}_s \equiv 0$  do značné míry libovolná. Ukazuje se však, že i když hamiltonián soustavy nezávisí na spinových proměnných, vede princip nerozlišitelnosti k závislosti celkové energie soustavy na výsledném spinu.

Schrödingerova rovnice (35) dá energiové spektrum, přičemž každé z energiových hladin přísluší nějaká symetrická nebo antisymetrická vlnová funkce  $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ . Pro soubor fermionů musí být však výsledná vlnová funkce (34)  $\psi(\xi_1, \xi_2)$  antisymetrická k záměně  $\xi_1, \xi_2$ .

To můžeme dosáhnout jedině tak, že k symetrické vlnové funkci  $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  dodáme antisymetrickou spinovou funkci  $X(\sigma_1, \sigma_2)$  a obráceně.

Ukážeme, že symetrické vlnové funkci

$$X^{(s)}(\sigma_1, \sigma_2) = X^{(s)}(\sigma_2, \sigma_1) \quad (36a)$$

přísluší výsledný spin 1 a antisymetrické

$$X^{(a)}(\sigma_1, \sigma_2) = -X^{(a)}(\sigma_2, \sigma_1) \quad (36b)$$

výsledný spin 0. Jestliže tedy symetrické a antisymetrické prostorové vlnové funkci

$$\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi^{(s)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (37a)$$

$$\varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\varphi^{(a)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (37b)$$

přísluší stavy s různou energií, bude tomu tak i u výsledných vlnových funkcí

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \begin{cases} \varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) X^{(s)}(\sigma_1, \sigma_2) & (38a) \\ \varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) X^{(a)}(\sigma_1, \sigma_2) & (38b) \end{cases}$$

Přitom ve stavu (38a) je výsledný spin roven 1 a ve stavu (38b) roven 0; jinými slovy: energie soustavy záleží na výsledném spinu.

Všimněme si nyní konstrukce spinové vlnové funkce  $X(\sigma_1, \sigma_2)$ ; mimo jiné tím dokážeme i tvrzení o výsledném spinu soustavy pro funkce (36). Celkovou vlnovou funkci  $X(\sigma_1, \sigma_2)$  můžeme vyjádřit jako lineární kombinaci ze všech možných součinů spinových funkcí  $\chi_{s_1}(\sigma_1)$ ,  $\chi_{s_2}(\sigma_2)$ , zavedených v odst.V.1.4; jestliže pro lepší přehlednost nahradíme

$\sigma_1 \rightarrow 1, \sigma_2 \rightarrow 2$  a kvantová čísla  $m_s = 1/2 \rightarrow \uparrow$ ,  $m_s = -1/2 \rightarrow \downarrow$ , je to součet čtyř součinů

$$X(1,2) = c_1 \chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)} + c_2 \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)} + c_3 \chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)} + c_4 \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}, \quad (39)$$

kde  $c_1, c_2, c_3, c_4$  jsou libovolná komplexní čísla.

Rozklad (39) je možný proto, že čtyři vypsané součiny tvoří bázi (můžete si ověřit, že tvoří úplný systém funkcí) ve 4-rozměrném prostoru stavových vektorů soustavy dvou spinů.

Spin je vektorová veličina (moment hybnosti). Výsledný spin soustavy částic získáme proto vektorovým součtem spinů jednotlivých částic. Označíme-li spinové operátory dvou částic (jde o operátory zavedené v odst. V.1.3)  $\vec{\mathcal{P}}_1, \vec{\mathcal{P}}_2$ , bude operátor výsledného spinu soustavy

$$\vec{\mathcal{P}} = \vec{\mathcal{P}}_1 + \vec{\mathcal{P}}_2 \quad (40a)$$

se složkami

$$\mathcal{P}_x = \mathcal{P}_{1x} + \mathcal{P}_{2x}, \quad \mathcal{P}_y = \mathcal{P}_{1y} + \mathcal{P}_{2y}, \quad \mathcal{P}_z = \mathcal{P}_{1z} + \mathcal{P}_{2z} \quad (40b)$$

Přímým výpočtem si můžeme ověřit, že i pro  $\vec{\mathcal{P}}$  platí komutační relace (V.26), např.

$$\begin{aligned} [\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y] &= [\mathcal{P}_{1x} + \mathcal{P}_{2x}, \mathcal{P}_{1y} + \mathcal{P}_{2y}] = [\mathcal{P}_{1x}, \mathcal{P}_{1y}] + [\mathcal{P}_{2x}, \mathcal{P}_{2y}] = \\ &= i\hbar \mathcal{P}_{1z} + i\hbar \mathcal{P}_{2z} = i\hbar \mathcal{P}_z \end{aligned} \quad (41)$$

Protože operátory  $\vec{\mathcal{P}}_1, \vec{\mathcal{P}}_2$  komutují (spiny u obou částic lze současně změřit), tj.

$$\vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2 = \vec{\mathcal{P}}_2 \vec{\mathcal{P}}_1 \quad ([\vec{\mathcal{P}}_1, \vec{\mathcal{P}}_2] = 0) \quad (42a)$$

nebo pro složky

$$\mathcal{P}_{1i} \mathcal{P}_{2j} = \mathcal{P}_{2j} \mathcal{P}_{1i} \quad ([\mathcal{P}_{1i}, \mathcal{P}_{2j}] = 0) \quad (i, j=x, y, z), \quad (42b)$$

je operátor kvadrátu velikosti výsledného spinu

$$\vec{\mathcal{P}}^2 = (\vec{\mathcal{P}}_1 + \vec{\mathcal{P}}_2)^2 = \vec{\mathcal{P}}_1^2 + \vec{\mathcal{P}}_2^2 + 2 \vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2 \quad (43a)$$

kde skalární součin  $\vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2$  je ve složkách

$$\vec{\mathcal{P}}_1 \vec{\mathcal{P}}_2 = \mathcal{P}_{1x} \mathcal{P}_{2x} + \mathcal{P}_{1y} \mathcal{P}_{2y} + \mathcal{P}_{1z} \mathcal{P}_{2z} \quad (43b)$$

Přímým výpočtem můžeme ověřit, že spolu vzájemně komutují čtveřice operátorů

$$\vec{\mathcal{P}}_1^2, \vec{\mathcal{P}}_2^2, \mathcal{P}_{1z}, \mathcal{P}_{2z} \quad (44)$$

a

$$\vec{\mathcal{P}}_1^2, \vec{\mathcal{P}}_2^2, \vec{\mathcal{P}}^2, \mathcal{P}_z \quad (45)$$

Čtyři funkce

$$\chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}, \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)}, \chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)}, \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}, \quad (46)$$

které jsme použili jako bázi v rozkladu (39), jsou právě společným souborem vlastních funkcí čtyř operátorů (44).

Pro naše účely je však výhodnější přejít k souboru vlastních funkcí čtveřice (45), neboť právě zde se vyskytuje celkový spin. Tento soubor

se bude ovšem lišit od (46), neboť  $\vec{J}^2$  nekomutuje s  $J_{1z}, J_{2z}$ .

Označíme-li stavové vektory, které tvoří tuto novou bázi, jako  $|S, M_S\rangle$ , bude platit

$$\vec{J}_1^2 |S, M_S\rangle = \vec{J}_2^2 |S, M_S\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |S, M_S\rangle \quad (47a)$$

$$\vec{J}^2 |S, M_S\rangle = S(S+1) \hbar^2 |S, M_S\rangle \quad (47b)$$

$$J_z |S, M_S\rangle = M_S \hbar |S, M_S\rangle \quad (47c)$$

Kvantová čísla  $S, M_S$  odpovídají  $s, m_s$  z odst. V.1.3 a V.1.4; tam jsme ovšem stavové vektory psali zkráceně  $|m_s\rangle$  (tj.  $|1/2\rangle$  a  $|-1/2\rangle$ ) místo  $|s, m_s\rangle$ , neboť kvantové číslo  $s$  nabývalo jen hodnoty  $\frac{1}{2}$ . Rovnice (47a) je vlastně (V.30), rovnice (47b) odpovídá (V.31b) a (47c) rovnici (V.43). Protože  $\vec{J}$  je moment hybnosti, musí být  $S$  kladné (a jak lze ukázat, rovně celočíselnému násobku  $1/2$ ) a  $M_S$  se bude opět po jednotce měnit od  $-S$  do  $S$  (celkem  $2S+1$  hodnot). Naším cílem nyní je najít:

(a) jakých hodnot mohou nabývat kvantová čísla  $S, M_S$ ,

(b) vyjádřit stavové vektory  $|S, M_S\rangle$  pomocí funkcí (46).

V podstatě jde o to, vybrat koeficienty  $c_1, c_2, c_3, c_4$  v (39) tak, aby rovnice (47) byly automaticky splněny.

Řešit postavený úkol znamená diagonalisovat matice reprezentující operátory  $J_z, \vec{J}^2$  v bázi (46). Ponecháme tuto proceduru čtenáři za cvičení a zde uvedeme jen výsledky; že splňují uvedené požadavky lze ověřit pouhým dosazením do rovnic (47).

Vlastní hodnoty operátoru  $\vec{J}^2$  jsou  $0, 2 \hbar^2$ , což odpovídá

$$S = 0 \quad \text{a} \quad S = 1 \quad (48a)$$

a pro

$$\begin{aligned} S = 0 \quad \text{je} \quad M_S &= 0 \\ S = 1 \quad \text{je} \quad M_S &= -1, 0, 1 \end{aligned} \quad (48b)$$

Odpovídající normalizované vlastní vektory  $|S, M_S\rangle$  jsou

$$\left. \begin{aligned} |1, 1\rangle &= \chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) \\ |1, 0\rangle &= 2^{-1/2} [\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\uparrow}(2)] \\ |1, -1\rangle &= \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\downarrow}(2) \end{aligned} \right\} \quad (49a)$$

$$|0, 0\rangle = 2^{-1/2} [\chi_{\uparrow}(1) \chi_{\uparrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1) \chi_{\downarrow}(2)] \quad (49b)$$

Tři funkce (49a) jsou symetrické k záměně  $1 \leftrightarrow 2$  ( $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$ ), zatímco funkce (49b) je antisymetrická. Soubor tří stavových vektorů  $|1, M_S\rangle$

( $M_S = 0, \pm 1$ ) tvoří triplet; vektor  $|0, 0\rangle$  se nazývá singlet.

Nyní již můžeme také vytvořit úplné vlnové funkce souboru dvou elektronů (38). Kombinací  $\varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  s tripletem (49a) dostaneme



3 vlnové funkce a kombinací  $\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  se singletem (49b) jednu funkci

$\psi(\xi_1, \xi_2)$ . Pro nezávislé elektrony (když v (9) např. zanedbáme poslední, interakční, člen) se dá vyjádřit  $\varphi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  i  $\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  pomocí jednočásticových funkcí typu (24), takže

k tripletovému stavu ( $S=1$ ) bude příslušet antisymetrická funkce

$$\begin{aligned} \varphi^{(a)}(r_1, r_2) &= 2^{-1/2} [\varphi_m(\vec{r}_1) \varphi_n(\vec{r}_2) - \varphi_n(\vec{r}_1) \varphi_m(\vec{r}_2)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \varphi_m(\vec{r}_1) & \varphi_n(\vec{r}_1) \\ \varphi_m(\vec{r}_2) & \varphi_n(\vec{r}_2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (50a)$$

a k singletu ( $S=0$ ) symetrická funkce

$$\varphi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 2^{-1/2} [\varphi_m(\vec{r}_1) \varphi_n(\vec{r}_2) + \varphi_n(\vec{r}_1) \varphi_m(\vec{r}_2)] \quad (50b)$$

kde  $m, n$  jsou soubory kvantových čísel, rozlišující jednočásticové stavy.

#### 4. Stručně o reprezentaci obsazovacích čísel

V předcházejících odstavcích jsme, při formulaci problému mnoha stejných částic, používali běžnou souřadnicovou reprezentaci. Nyní by nám však již mělo být jasné, že pro tuto problematiku to není reprezentace nejvhodnější. Při psaní operátorů zobrazujících měřitelné veličiny (např. hamiltoniánu) i vlnových funkcí (tj. stavových vektorů) se zde vlastně stále vychází z předpokladu, že částice jsou rozlišitelné. Projevuje se to tím, že "... poloha částice i je určena polohovým vektorem  $\vec{r}_i$  a její spin proměnnou  $\sigma_i$  ..." apod. Důsledkem tohoto rozlišování pak je, že musíme konstruovat symetrické a antisymetrické vlnové funkce, má-li se naplnit požadavek principu nerozlišitelnosti.

Pracujeme-li v aproximaci nezávislých částic (odst. 2), je vlastně jedinou informací, kterou nám symetrická nebo antisymetrická funkce dávají, počet částic v jednotlivých jednočásticových stavech (24). Potom je však přirozenější vyloučit z vlnových funkcí soustavy zbytečný balast, jakým jsou proměnné  $\xi_1, \dots, \xi_N$  a rozlišovat stavové vektory (stavy soustavy) pouze obsazovacími čísly  $n_1, n_2, \dots, n_i, \dots$  jednotlivých jednočásticových stavů. Stavový vektor soustavy  $N$  nerozlišitelných částic se v této tzv. reprezentaci obsazovacích čísel zapisuje takto

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (51)$$

kde podle (24)

$$\begin{array}{rcl}
 n_1 & \text{je počet částic ve stavu s vlnovou funkcí} & \psi_1(\xi) \\
 n_2 & \text{ } & \psi_2(\xi) \\
 \vdots & \text{ } & \vdots \\
 n_i & \text{ } & \psi_i(\xi) \\
 \vdots & \text{ } & \vdots
 \end{array} \quad (52a)$$

přičemž

$$n_1 + n_2 + \dots + n_i + \dots = N \quad (52b)$$

V souborech bosonů může každé z obsazovacích čísel  $n_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) nabývat libovolných hodnot, v souborech fermionů pak jen hodnot 0,1.

Na tomto místě je třeba poznamenat, že s reprezentací obsazovacích čísel se často setkáme též pod názvem druhé kvantování. Název je logický v kvantové teorii pole, kde byl tento formalismus prvně zaveden a v plné šíři uplatněn.

Chceme-li pracovat beze zbytku se stavovými vektory (51), místo s vlnovými funkcemi závislými na souřadnicích, musíme především vyjádřit všechny operátory tak, aby působily (tzn definovat jejich působení) na stavové vektory (51). K tomu účelu je výhodné definovat dva jednoduché operátory, pomocí nichž se pak již vyjádří všechny další. Protože definice těchto operátorů se poněkud liší pro bosony a fermiony, provedeme to pro každou skupinu zvlášť.

#### Bosony

Definujeme operátory  $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$  ( $i=1,2,\dots$ ) vztahy:

$$\hat{a}_i | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \quad (53a)$$

$$\hat{a}_i^+ | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} | n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots \rangle \quad (53b)$$

(nevypsaná obsazovací čísla se nemění).

Vidíme, že působením operátoru  $\hat{a}_i$  na stavový vektor dostáváme stavový vektor pro soubor částic, v němž je o jednu částici v  $i$ -tém stavu méně. Proto se  $\hat{a}_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) nazývá anihilační operátor. Operátor  $\hat{a}_i^+$  ( $i=1,2,\dots$ ) působí opačně; protože dává stavový vektor stavu, v němž je v  $i$ -tém stavu o jednu částici více, nazývá se kreační operátor. Číselné koeficienty  $\sqrt{n_i}, \sqrt{n_i+1}$  v (53), zajišťují normalizaci funkcí získaných působením operátorů  $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ . Je zřejmé, že postupným působením kreačních a anihilačních operátorů lze z libovolného stavového vektoru získat jakýkoliv jiný stavový vektor. Protože každý operátor dělá v podstatě jen to, že každému z vektorů prostoru stavových vektorů přiřazuje nějaký vektor z téhož prostoru, je zřejmé, že musí být možné vyjádřit libovolný operátor uspořádanou skupinou anihilačních a kreačních operátorů.

Uveďme si příklad: máme stav soustavy se stavovým vektorem

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

a chceme pomocí operátorů (53) dostat stavový vektor soustavy, v níž je o jednu částici v  $i$ -tém stavu méně a o jednu částici v  $j$ -tém stavu více (můžeme to také interpretovat tak, že jedna částice přešla z  $i$ -tého do  $j$ -tého stavu). Hledaná funkce je

$$\hat{a}_j^+ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \sqrt{n_i(n_i+1)} |n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots, n_j+1, \dots\rangle \quad (54)$$

### Fermiony

I zde definujeme anihilační  $\hat{c}_i$  a kreační  $\hat{c}_i^+$  ( $i=1,2,\dots$ ) operátory.

Na rozdíl od bosonů však musí být definovány tak, aby odrážely specifické vlastnosti souborů fermionů; především jde o antisymetrii stavových vektorů při transpozici dvou fermionů, resp. Pauliho princip, který se projevuje v tom, že obsazovací čísla mohou nabývat pouze hodnot 0,1. Je možné přímým výpočtem ověřit, že všem požadavkům vyhovují definice:

$$\hat{c}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} |n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots\rangle \quad (55a)$$

$$\hat{c}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} (1-n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i+1, \dots\rangle \quad (55b)$$

$$\text{kde } \sum_1 = n_1 + n_2 + \dots + n_{i-1} \quad (55c)$$

Uveďme si příklad: nechť na stavový vektor  $|1,1,0,0,\dots\rangle$  působí operátor reprezentovaný součinem (pro přehlednost nepíšeme nad  $c$  " $\wedge$ ")

$$\begin{aligned} & c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 c_3^+ c_1 \\ & c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 c_3^+ c_1 |1,1,0,0,\dots\rangle = (-1)^0 c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 c_3^+ |0,1,0,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 c_2^+ c_3 c_1^+ c_2 |0,1,1,0,\dots\rangle = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 c_2^+ c_3 c_1^+ |0,0,1,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 (-1)^0 c_2^+ c_3 |1,0,1,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 (-1)^0 (-1)^1 c_2^+ |1,0,0,0,\dots\rangle = \\ & = (-1)^0 (-1)^1 (-1)^0 (-1)^0 (-1)^1 (-1)^1 |1,1,0,0,\dots\rangle = -|1,1,0,0,\dots\rangle \end{aligned}$$

Rozvážíte-li postupné působení operátorů, dojdete k závěru, že v konečném výsledku došlo k výměně částic ve stavech 1,2 a stavový vektor skutečně přitom změnil znaménko.

Operátory  $\hat{a}_i$ ,  $\hat{a}_i^+$ , resp.  $\hat{c}_i$ ,  $\hat{c}_i^+$ , nejsou hermitovské (lze dokázat, že jsou hermitovsky sdružené, takže  $\hat{a}_i^+ = (\hat{a}_i)^\dagger$  nebo  $\hat{c}_i^+ = (\hat{c}_i)^\dagger$ ) a nereprezentují proto žádnou měřitelnou fyzikální veličinu.

Hermitovský je však operátor

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \text{ nebo } \hat{n}_i = \hat{c}_i^+ \hat{c}_i \quad (i=1,2,\dots) \quad (56)$$

který se nazývá operátor počtu částic v i-tém stavu. Necháme-li ho působit na  $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ , dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} \hat{a}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle = \\ &= \sqrt{n_i} \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \end{aligned} \quad (57)$$

Stejný výsledek dostaneme pro fermiony, takže obecně

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (58)$$

kde  $n_i$  před stavovým vektorem na pravé straně je číslo, které udává počet částic ve stavu  $\psi_i$ . Rovnice (58) je rovnicí (IV.38) pro vlastní vektory a vlastní hodnoty operátoru počtu částic v i-tém stavu; vektory  $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$  jsou jeho vlastními vektory a obsazovací čísla  $n_i$  jsou jeho vlastními hodnotami.

Operátor celkového počtu částic pak je

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i \quad (59)$$

(sumace se provádí přes všechny jednočásticové stavy, kterých může být obecně nekonečně mnoho!).

Pro práci s kreačními a anihilačními operátory mají prvořadý význam komutační relace pro tyto operátory. Získat je lze přímo z definičních vztahů (53), (55); tak vedle (57) platí, při obráceném pořadí operátorů,

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (n_i + 1) |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (60)$$

Odtud a z (57) je vidět, že operátor  $(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i)$  působí stejně jako jednotkový operátor. Jinak řečeno: platí komutační relace

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = \hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \mathbb{1}. \text{ Analogickým postupem je možné získat}$$

i komutátory pro ostatní kombinace kreačních a anihilačních operátorů.

Souhrnně: pro bosonové operátory platí komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] &= 0 \quad \text{pro } i \neq j, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_i^+] = \mathbb{1} \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j] &= 0, \quad [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0 \quad \text{pro všechna } i, j \end{aligned} \quad (61)$$

Pro fermionové operátory  $\hat{c}_i, \hat{c}_j^+$  ( $i, j=1,2,\dots$ ) platí obdobné antikomutační relace

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^+\} &= \hat{c}_i \hat{c}_j^+ + \hat{c}_j^+ \hat{c}_i = 0 \quad \text{pro } i \neq j, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_i^+\} = \mathbb{1} \\ \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} &= 0, \quad \{\hat{c}_i^+, \hat{c}_j^+\} = 0 \quad \text{pro všechna } i, j \end{aligned} \quad (62)$$

Poznámka: antikomutátorem dvou operátorů  $\mathcal{A}$ ,  $\mathcal{B}$  se nazývá výraz  $(\mathcal{A}\mathcal{B} + \mathcal{B}\mathcal{A})$ ; značí se obvykle  $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$  nebo  $[\mathcal{A}, \mathcal{B}]_+$ .

Zde je vhodné zdůraznit, že definiční vztahy pro kreační a anihilační operátory, spolu s komutačními, resp. antikomutačními, relacemi, zahrnují v sobě všechny požadavky, které jsme na vlnové funkce (stavové vektory) souborů stejných částic měli. Jestliže je ve výpočtech (podle potřeby) užijeme, nemusíme se již starat o symetrii, resp. antisymetrii, vlnových funkcí (stavových vektorů).

#### Vakuový stav

Již jsme řekli, že pomocí kreačních a anihilačních operátorů můžeme z libovolného stavového vektoru získat jakýkoliv jiný. Zvláštní postavení mezi stavovými vektory má stavový vektor tzv. vakuového stavu

$$|0\rangle \equiv |0, 0, \dots, 0, \dots\rangle, \quad (63)$$

v němž všechna obsazovací čísla jsou rovna nule (stav bez částic). Ket-vektor pro libovolný stav z něho získáme působením příslušných kreačních operátorů. Např.

$$|1, 1, 1, 0, 0, \dots\rangle = a_1^+ a_2^+ a_3^+ |0, 0, \dots\rangle$$

#### Základní stav souboru fermionů

Při práci se soubory fermionů je výhodnější vycházet ze stavového vektoru základního stavu, v němž jsou obsazeny všechny hladiny až po Fermiho energii (odst. 2, obr. 68b, 69). Jsou-li stavy číslovány v pořadí rostoucí energie (viz (29)), potom stavový vektor základního stavu souboru N fermionů je

$$|z\rangle \equiv |l_1, l_2, l_3, \dots, l_N, 0, 0, \dots\rangle \quad (64)$$

Ket-vektor  $|z\rangle$  získáme z vakuového stavu  $|0\rangle$  takto

$$|z\rangle = c_1^+ c_2^+ \dots c_N^+ |0\rangle \quad (65)$$

#### Operátory v reprezentaci obsazovacích čísel

Nyní nám již zbývá ukázat, jak se v reprezentaci obsazovacích čísel (tj. pomocí kreačních a anihilačních operátorů) vyjádří libovolný operátor. K tomu se využije věta, která tvrdí: jestliže všechny maticové prvky dvou operátorů, vypočtené pomocí stavových vektorů ve dvou různých reprezentacích, jsou stejné, potom operátory jsou ekvivalentní (o maticovém vyjádření operátorů viz odst. IV.1.5).

V našem případě to znamená požadavek, aby všechny maticové prvky nějakého operátoru v souřadnicové reprezentaci, vytvořené užitím funkcí (27) nebo (28), byly shodné s maticovými prvky získanými "obložením" hledaného operátoru bra- a ket-vektory (51). Realizace tohoto úkolu není zvlášť obtížná, je však zdlouhavá a proto uvedeme jen výsledky ([12]).

Uvažujme nejprve operátory, které jsou v souřadnicové reprezentaci součtem jednočásticových operátorů, tj operátory typu

$$\sigma_1(\{f_1, \dots, f_N\}) = \sigma_1(\{f_1\}) + \sigma_1(\{f_2\}) + \dots + \sigma_1(\{f_N\}) \quad (66)$$

Příkladem mohou být :

(i) operátor kinetické energie souboru N stejných částic

$$\mathcal{T} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla_{\vec{r}_i}^2 = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right)$$

(ii) operátor potenciální energie souboru N elektronů v poli jádra s nábojem +Ze, pevně umístěným v počátku souřadnic

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i|}$$

( v obou případech nevystupují explicitně spinové souřadnice ).

Operátory (66) mají v reprezentaci obsazovacích čísel tvar

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \sum_{i,j} \langle i | \sigma_1 | j \rangle \hat{c}_i^+ \hat{c}_j \\ \text{nebo} \\ \sigma_1 &= \sum_{i,j} \langle i | \sigma_1 | j \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \end{aligned} \quad (67a)$$

kde maticový prvek

$$\langle i | \sigma_1 | j \rangle = \sum_{\sigma} \int d\tau \psi_i^*(\vec{r}, \sigma) \sigma_1(\vec{r}, \sigma) \psi_j(\vec{r}, \sigma) \quad (67b)$$

se počítá s jednočásticovými vlnovými funkcemi (24). Principiálně je možné k výpočtu použít libovolný úplný soubor jednočásticových funkcí. Protože ale kreační a anihilační operátory pak provádějí kreaci nebo anihilaci v těchto stavech, budeme používat pochopitelně takové soubory funkcí, které mají k řešení úloze nejbližší.

Druhým běžným typem operátorů jsou dvoučásticové operátory, které v souřadnicové reprezentaci mají strukturu

$$\sigma_2(\{f_1, \dots, f_N\}) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} \sigma_2(\{f_i, f_j\}) \quad (68)$$

( součet členů z nichž každý závisí na dvojici souřadnic ).

Typickým představitelem takových operátorů je operátor potenciální energie vzájemné elektrostatické interakce v souboru nabitých stejných částic.

Pro soubor  $N$  elektronů (pro 2 elektrony je to poslední člen v (9)) je operátor elektron-elektronové interakce v souřadnicové reprezentaci

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

(faktor  $1/2$  je zde proto, že v sumaci se bere každá interakce 2x, tj.  $i$ -tý s  $j$ -tým a  $j$ -tý s  $i$ -tým; interakce elektronu sama se sebou je vyloučena požadavkem  $i \neq j$ ).

Dvoučasticové operátory (68) mají v reprezentaci obsazovacích čísel tvar

$$\begin{aligned} \sigma_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{k,l} \langle i,j | \sigma_2 | k,l \rangle \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_l \hat{a}_k \\ \text{resp.} \quad \sigma_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{k,l} \langle i,j | \sigma_2 | k,l \rangle \hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_l \hat{c}_k \end{aligned} \quad (69a)$$

kde maticový element

$$\begin{aligned} \langle i,j | \sigma_2 | k,l \rangle &= \\ &= \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \int d\tau \int d\tau' \psi_i^*(\vec{r}, \sigma) \psi_j^*(\vec{r}', \sigma') \sigma_2(\vec{r}, \sigma, \vec{r}', \sigma') \psi_k(\vec{r}, \sigma) \psi_l(\vec{r}', \sigma') \end{aligned}$$

je opět vytvořen s jednočasticovými vlnovými funkcemi (24); o jejich výběru platí to, co bylo již řečeno u jednočasticových operátorů. Je samozřejmé, že když je transformovaný operátor součtem několika členů (např. (9)), musíme pro převod všech členů užít též soubor jednočasticových funkcí (24).

Nyní jsme již ve stadiu, kdy máme v podstatě zavedeno vše, co pro řešení úloh v reprezentaci obsazovacích čísel je třeba. Výhodnost a názornost této reprezentace vynikne až při řešení konkrétních úloh; to však již není předmětem tohoto dílu skript. Jistě je však účelné říci ještě toto: reprezentace obsazovacích čísel bývá zpravidla zařazována až do "vyšších" partií kvantové mechaniky, což pak vyvolává u studentů dojem zvláštní obtížnosti. Hledají pak záhady tam, kde žádné nejsou a domnívají se, že věc nepochopili proto, že se jim zdá příliš jednoduchá. Proto bych chtěl explicitně uvést, že tato partie kvantové mechaniky není o nic obtížnější než jiné její části; naopak, podle mého názoru je reprezentace obsazovacích čísel pro soubory částic mnohem jednodušší, průhlednější a názornější při interpretaci výsledků, než standardní souřadnicová reprezentace. To byl také důvod k zařazení alespoň krátkého odstavce na toto téma do tohoto úvodního skriptu.