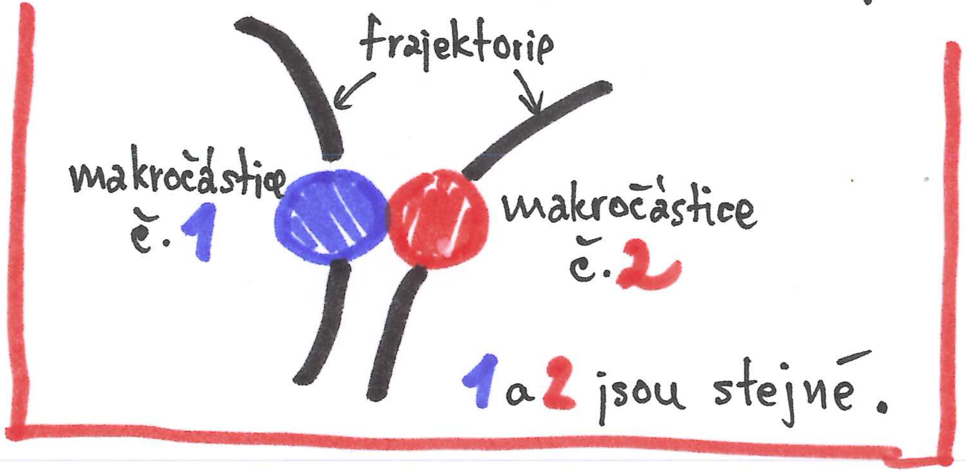
6. týden

Mnohaelektronové systémy

Začněme u systému tvořeném **dvěma částicemi**.

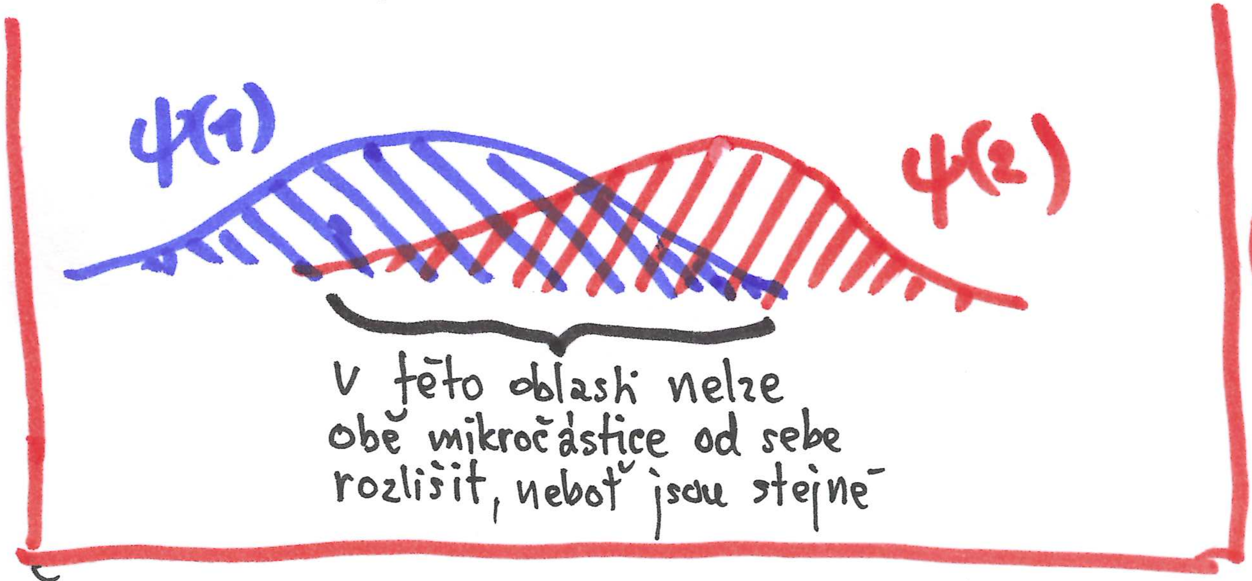
Jsou-li částice **stejné**, chovají se různě v závislosti na tom, zda to jsou makročástice (bez vlnových vlastností) nebo mikročástice (s vlnovými vlastnostmi).

Dvě stejné makročástice lze od sebe fyzikálně rozlišit, neboť mají přesně definovanou trajektorii a vzájemně se neprostupují:



(1)

Dvě stejné mikročástice (např. 2 elektrony) však od sebe <u>fyzikálně rozlišit nelze</u>, neboť kvantová mechanika <u>neumožňuje</u> definovat trajektorii (viz Heisenbergův princip neurčitosti), a navíc, vlnové funkce mikročástic se <u>vzájemně prostupují</u> (viz tunelový jev):



(2)

Čím <u>blíže</u> u sebe mikročástice jsou, tím jsou <u>nerozlišitelnější</u>.

Matematicky formulujeme nerozlišitelnost mikročástic požadavkem, že

prostorové rozložení pravděpodobnosti výskytu obou mikročástic nesmí záviset na jejich výměně $1 \Leftrightarrow 2$, tj.

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2 \qquad (3)$$

kde $\psi(1,2)$ je společná vlnová funkce obou mikročástic.

!

PRINCIP NEROZLIŠITELNOSTI MIKROČÁSTIC

Z principu nerozlišitelnosti (3) plyne:

$$\psi(1,2) = \psi(2,1) \quad \textbf{nebo} \quad \psi(1,2) = -\psi(2,1) \qquad (4)$$

vlnová funkce obou mikročástic je **symetrická** při záměně $1 \Leftrightarrow 2$

vlnová funkce obou mikročástic je **antisymetrická** při záměně $1 \Leftrightarrow 2$

!

Existují experimenty ukazující, že

> mikročástice se **symetrickou** vlnovou funkcí mají **celočíselný spin** $(s = 0, 1, 2, \ldots)$:
> tyto mikročástice nazýváme **BOSONY** (Ch. Bose)

! (5)

> mikročástice s **antisymetrickou** vlnovou funkcí mají **poločíselný spin** $(s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots)$:
> tyto mikročástice nazýváme **FERMIONY** (E. Fermi)

! (6)

Příklady **bosonů**: foton, atom hélia, jaderná α-částice

Příklady **fermionů**: elektron, proton, neutron, hyperon.

- Vlnová funkce dvou nerozlišitelných **bosonů**:

$$\psi^{bos}_{ab}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)\right\} \quad (7)$$

symetrická funkce při záměně $1 \leftrightarrow 2$

$\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}}$ ... kvantové stavy jednotlivých bosonů

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ ... důsledek normovací podmínky $\iint |\psi^{bos}_{ab}(1,2)|^2 dx_1 dx_2 = 1$

- Vlnová funkce dvou nerozlišitelných **fermionů**:

$$\psi^{ferm}_{ab}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)\right\} \quad (8)$$

antisymetrická funkce při záměně $1 \leftrightarrow 2$

Zdánlivě nevýznamný rozdíl znamének ⊕ a ⊖ ve výrazech **(7)** a **(8)** má **dramatické důsledky**, jsou-li kvantové stavy $\underline{\underline{a}}$ a $\underline{\underline{b}}$ stejné, tj. **a = b**.

Pak z výrazu **(7)** dostáváme:

$$\psi_{aa}^{bos}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_a(1)\psi_a(2) + \psi_a(2)\psi_a(1)\} = \frac{1}{\sqrt{2}} 2\, \psi_a(1)\psi_a(2)$$

⇓

$$|\psi_{aa}^{bos}(1,2)|^2 = 2|\psi_a(1)|^2|\psi_a(2)|^2 \qquad (9)$$

pravděpodobnost nalezení 2 nerozlišitelných bosonů v tėmže stavu $\underline{\underline{a}}$ je dvakrát větší než statistická pravděpodobnost rovná součinu $|\psi_a(1)|^2$ a $|\psi_a(2)|^2$.

Princip bosonové kondenzace v jediném kvantovém stavu.

Pro **fermiony** je však situace velmi odlišná:

Z výrazu **(8)** dostáváme:

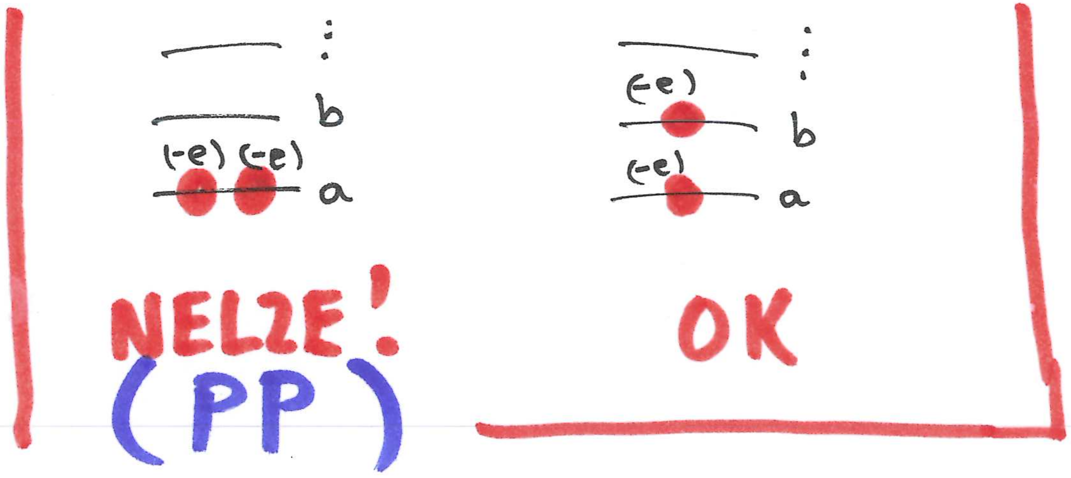
$$\psi^{ferm}_{aa}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_a(1)\psi_a(2) - \psi_a(2)\psi_a(1)\} = 0$$

$$\left|\psi^{ferm}_{aa}(1,2)\right|^2 = 0 \qquad (10)$$

pravděpodobnost nalezení dvou nerozlišitelných fermionů ve témže stavu a je NULOVÁ.

PAULIHO PRINCIP (PP).

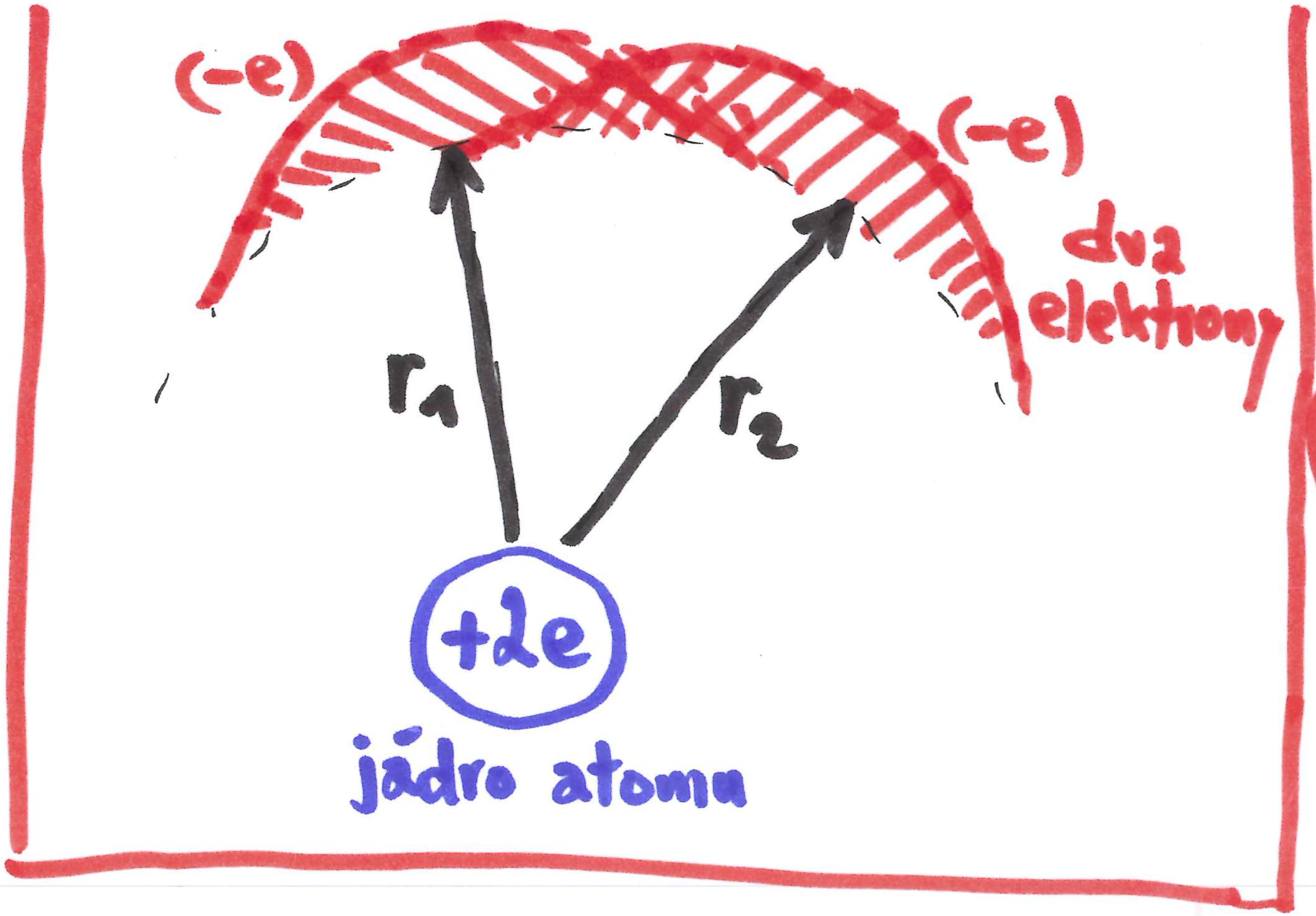
Z Pauliho principu plyne, že 2 nerozlišitelné fermiony (např. 2 elektrony v atomu) nemohou obsadit tentýž kvantový stav:



(11)

Nyní se podíváme na 2 nejjednodušší systémy, v nichž se <u>nerozlišitelnost elektronů</u> a s ní spojený <u>Pauliho princip</u> mohou zřetelně projevit:

• Atom hélia (He)



(12)

Schrödingerova rovnice pro 2 elektrony v elektrostatickém poli jádra (+2e):

$$\left[\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1+\frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{(-e)(+2e)}{r_1}\right\}+\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2+\frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{(-e)(+2e)}{r_2}\right\}+\frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{(-e)(-e)}{r_2-r_1}\right]\psi(1,2)=E.\,\psi(1,2)$$

- první složená závorka: potenciální energie jednoho elektronu v poli jádra
- druhá složená závorka: potenciální energie druhého elektronu v poli jádra
- poslední člen: interakce mezi oběma elektrony
- E: energie obou elektronů

$$\Delta_i=\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\qquad i=1,2$$

$$r_i=\sqrt{x_i^2+y_i^2+z_i^2}$$

(13)

Řešení je rutinní, byť zdlouhavá matematická operace. Hlavní výsledky lze formulovat takto:

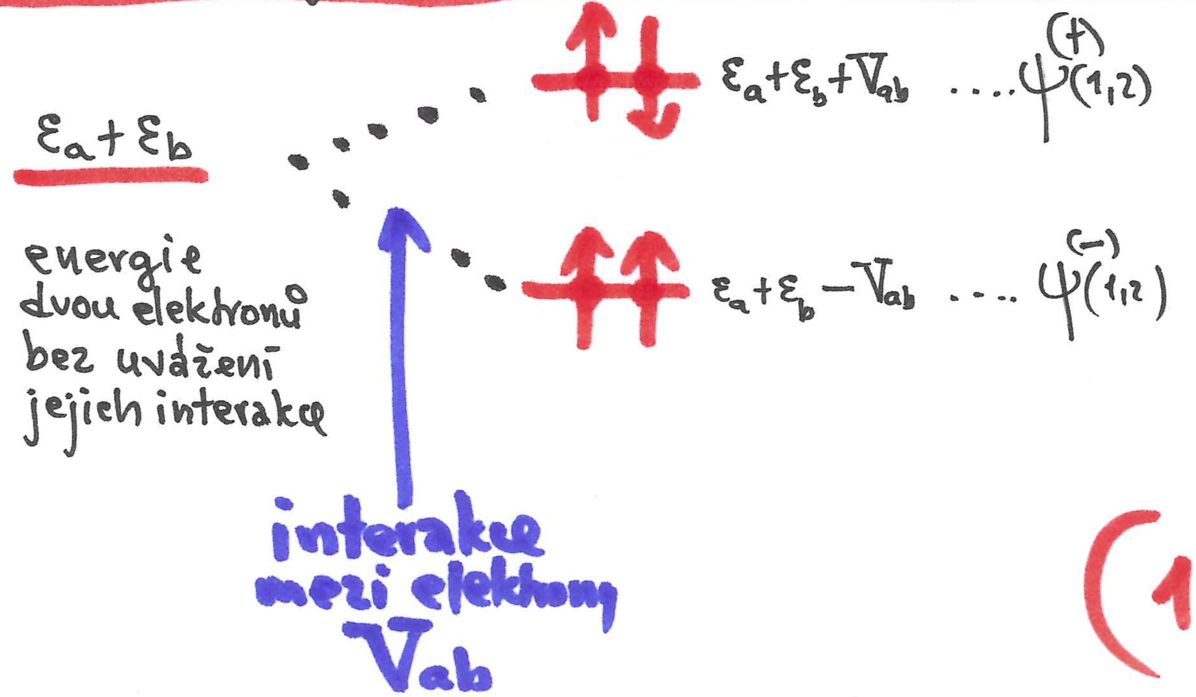
$$E=\begin{cases}\varepsilon_a+\varepsilon_b+V_{ab} & \ldots\ \psi^{(+)}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(1)\psi_b(2)+\psi_a(2)\psi_b(1)\right)\sigma(\uparrow\downarrow)\\ \varepsilon_a+\varepsilon_b-V_{ab} & \ldots\ \psi^{(-)}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(1)\psi_b(2)-\psi_a(2)\psi_b(1)\right)\sigma(\uparrow\uparrow)\end{cases}$$

$\sigma(\uparrow\downarrow)$ .... funkce představující <u>antiparalelní</u> orientaci spinů elektronů

$\sigma(\uparrow\uparrow)$ ... - - - - - - - - - <u>paralelní</u> - - - - - - -

(14)

Matematické výsledky (14) můžeme názorně interpretovat graficky:

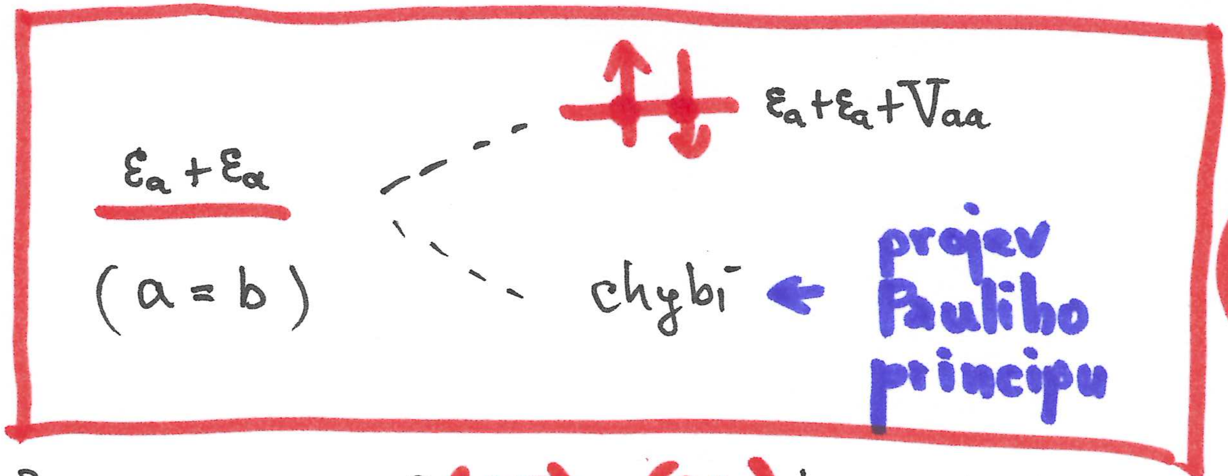


(15)

Interakce mezi elektrony způsobí:

- **rozštěpení** energetických hladin volných elektronů;
- **orientaci spinů** elektronů v rozštěpených hladinách.

Povšimněme si, že funkce $\psi^{(-)}(1,2)$ je podle (14) nulová, když $a = b$ (projev Pauliho principu). V tomto případě tedy dolní rozštěpená hladina s paralelně orientovanými spiny nevzniká!



(16)

Pomocí výsledků (15) a (16) lze nalézt všechny energetické hladiny atomu He:

(17)

Toto uspořádání nejnižších energetických hladin atomu He má **2 závažné důsledky**:

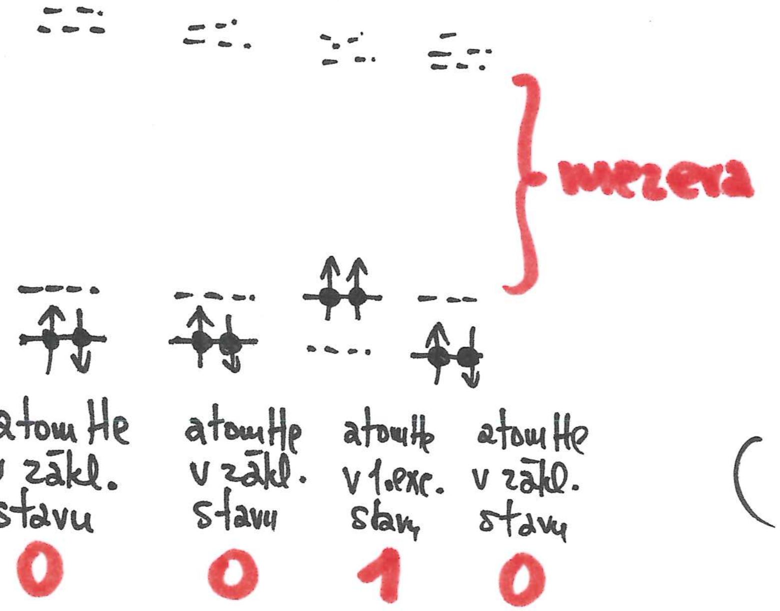
(1)

atom He v základním stavu = **boson**

(klíč k pochopení supratekutosti He – viz 7. týden)

(18)

(2)

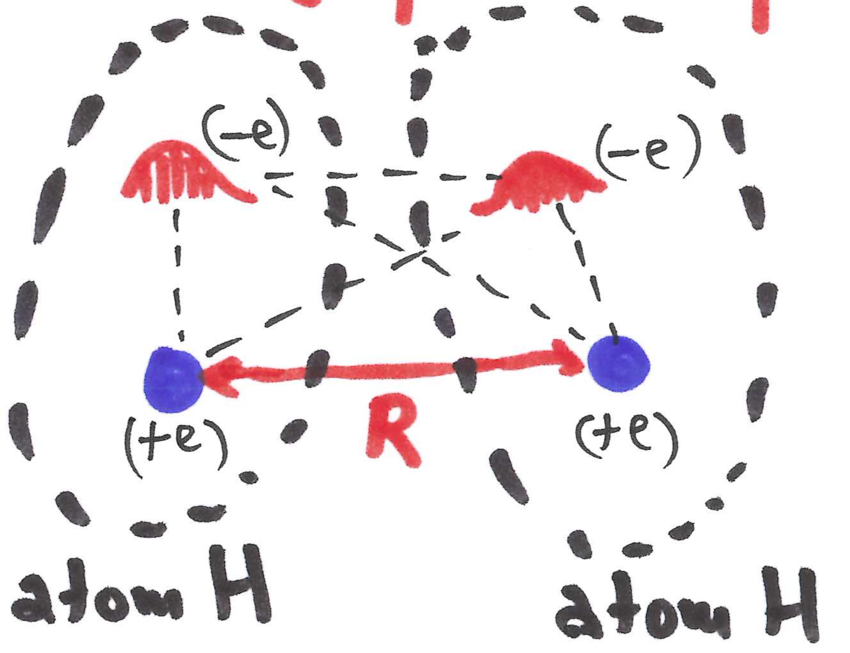


soubor atomů He = registr pro binární kódování čísel v kvantovém počítači (viz 12. týden).

(19)

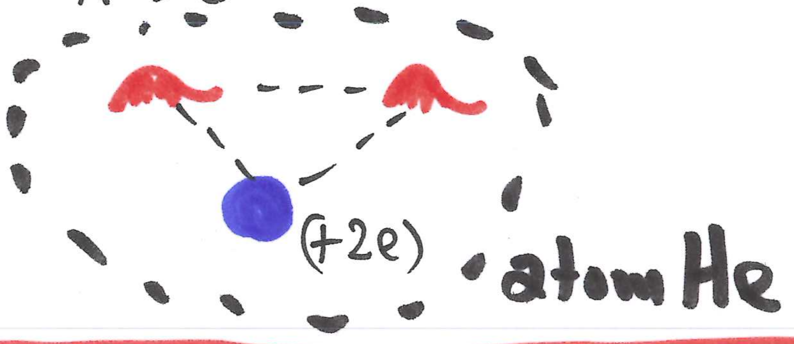
Podobný systém jako atom He tvoří

2 interagující atomy vodíku :



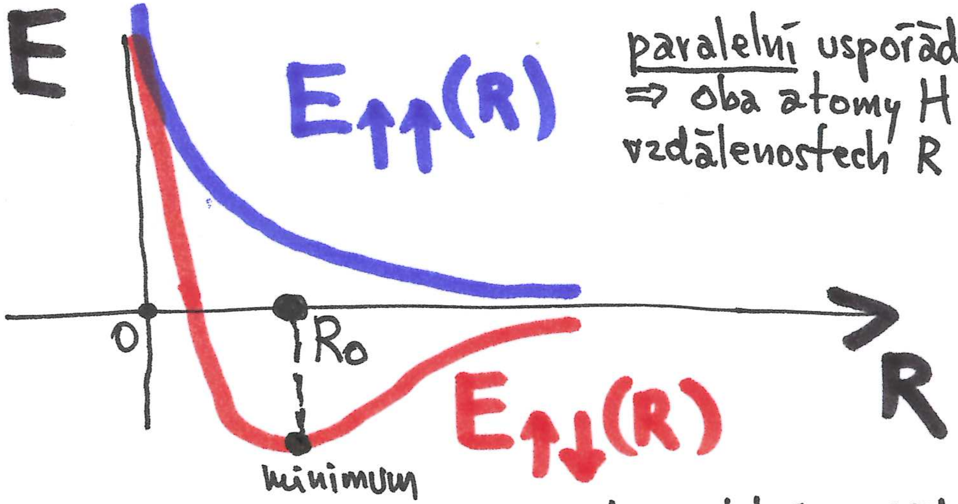
<u>Poznámka:</u>

Atom He je limitním případem 2 atomů H pro $R \to 0$



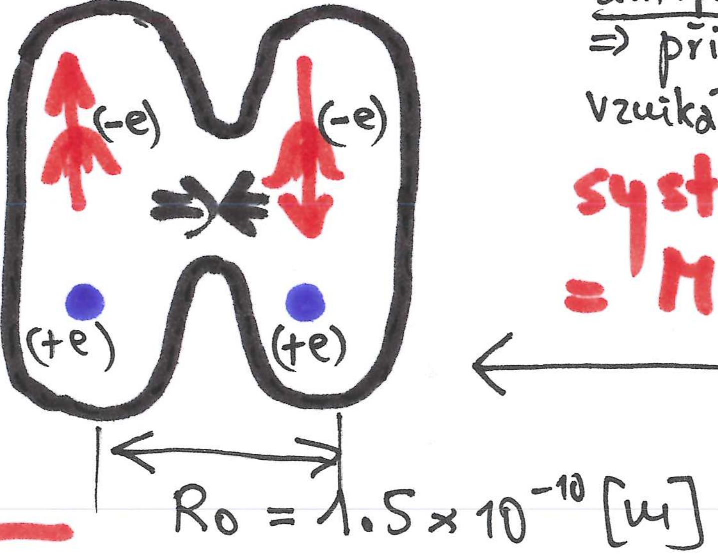
(20)

Sestavení a řešení Schrödingerovy rovnice pro 2 atomy H je zase matematicky komplikovanější. Hlavní výsledek je <u>závislost energie obou atomů na R</u>, tj. na vzdálenosti jejich jader:

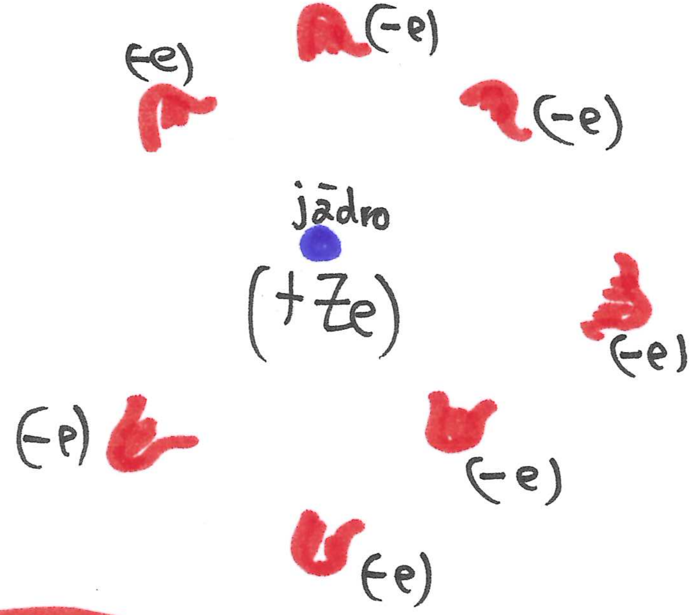


paralelní uspořádání spinů elektronů ⇒ oba atomy H se při všech vzdálenostech R **odpuzují**

antiparalelní uspořádání spinů elektronů ⇒ při vzdálenosti $R_0 = 1.5 \times 10^{-10}$ [m] vzniká **stabilní vázaný systém obou atomů = MOLEKULA H_2** !



Mnohaelektronové atomy



$\underline{\underline{Z}}$ elektronů

$Z > 2$

(22)

V takových atomech je příslušná Schrödingerova rovnice pro systém $\underline{\underline{Z}}$ nerozlišitelných elektronů matematicky **neřešitelná**.

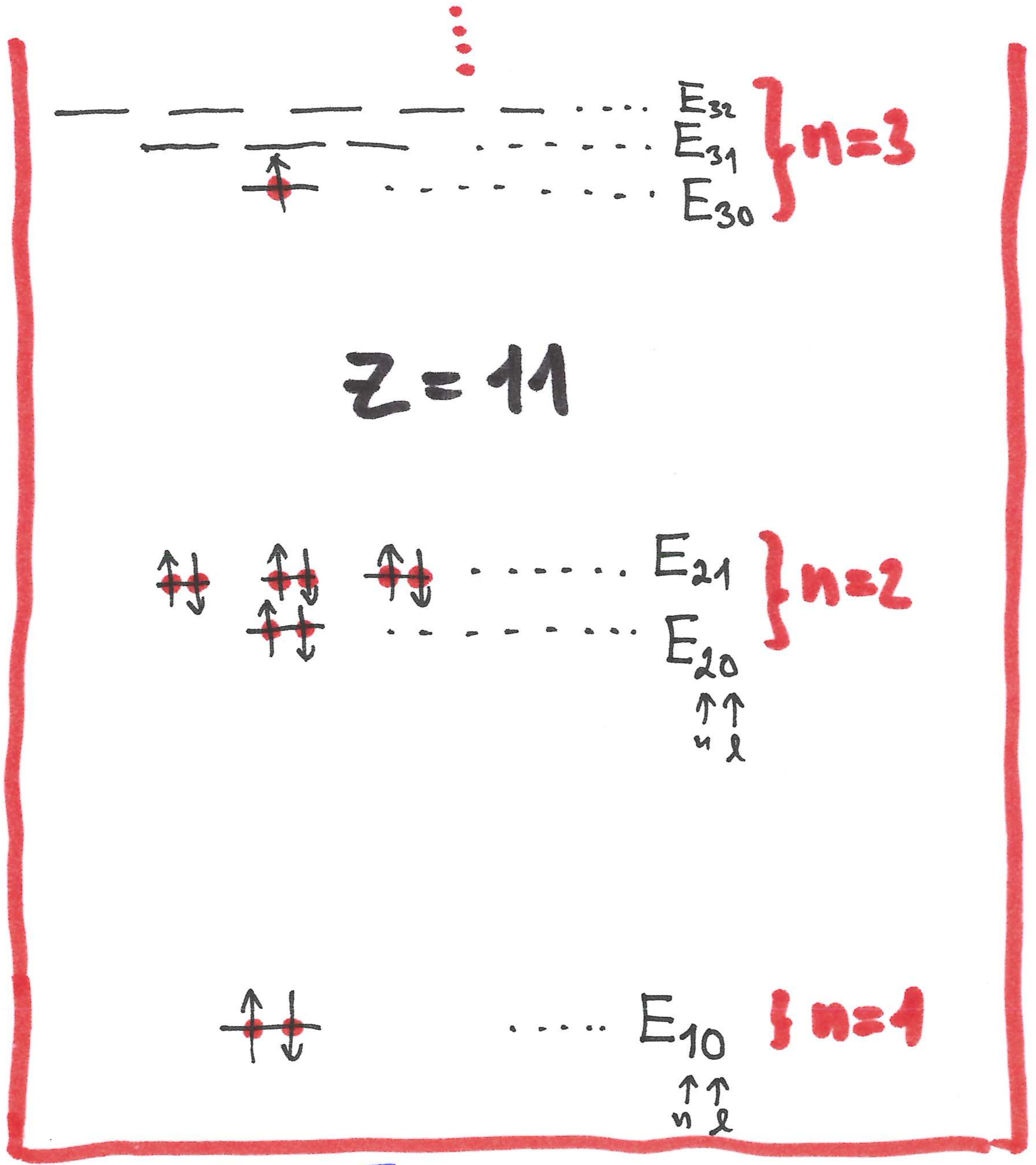
Jsou proto nutné **aproximace**.

Tou nejužitečnější se ukazuje aproximace **středního atomárního pole**:

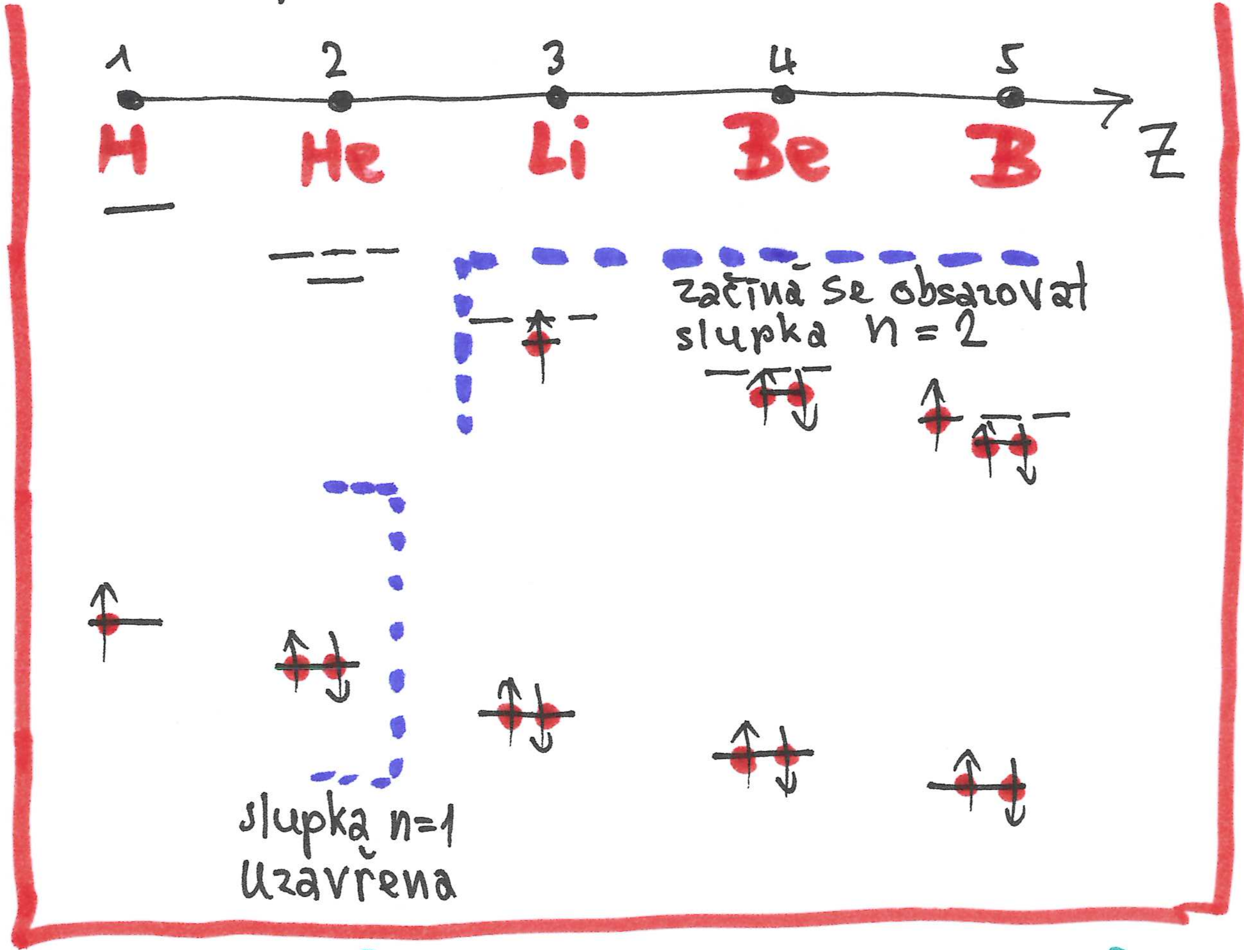
Neřeší se Schrödingerova rovnice, ale najde se **střední hodnota interakce** mezi všemi elektrony navzájem takovým způsobem, že vznikne **stabilní atomární pole**, v němž se pak každý individuální elektron pohybuje **volně**, tj. bez interakce s ostatními elektrony. (23)

Princip středního atomárního pole

Jako ukázku takové aproximace si ukážeme **konfiguraci 11 elektronů** v atomu sodíku Na ($Z = 11$):



(24)

ATOMÁRNÍ SLUPKY (n=1, n=2, n=3)

Obsazování jednotlivých slupek se děje **v souladu s Pauliho principem** a vede k **periodickému systému atomů**, intuitivně předpovězenému D. Mendělejem 100 let před kvantovou mechanikou :