Kvantummechanika XVI.

A többtestproblémák általános megfogalmazása
Pauli elv, periódusos rendszer

Két részecskés rendszerek: → Egyetlen részecskére $\psi(\vec{r},t)$ a helykoordinátától és az idő függvénye (spint egyelőre ignoráljuk). Egy két részecskés rendszer állapota az első részecske $\vec{r}_1$ és a második részecske $\vec{r}_2$ helykoordinátáinak függvénye:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

→ Az időbeni fejlődését a Schrödinger-egyenlet adja meg:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi,$$

ahol $H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ / feltételezzük, hogy nincs külső tér/

→ A statisztikai interpretáció a következőképpen:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

→ annak a valószínűsége az 1. részecskét $d^3\vec{r}_1$, a másodikat $d^3\vec{r}_2$ térfogatban találjuk.

$$\Downarrow$$

$$\int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = 1$$

→ Időfüggetlen potenciálokra: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

→ Ahol $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ kielégíti az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2\psi + V\psi = E\psi$$

→ Itt E a rendszer teljes energiája.

Bosonok és fermionok: Tfh az első részecske $\psi_a(\vec{r})$, a második $\psi_b(\vec{r})$ állapotban van. Ebben az esetben:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2)$$

→ Valójában amit mondhatunk az az, hogy az egyik részecske ψ_a, míg a másik ψ_b állapotban van, de azt nem tudjuk, hogy melyik-melyikben. Minden elektron (pl.) megegyezik, identikus oly módon, ahogy egyetlen klasszikus fizikai objektum sem tud lenni egy másikkal. Nem létezik olyan, hogy „ez" az elektron v. „az" az elektron, csak „EGY" elektron van.

→ A kvantummechanika képes kezelni az azonos részecskék esetét. Egyszerűen egy olyan állapotfüggvényt kell konstruálnunk, mely nincs tekintettel arra, hogy melyik részecske melyik állapotban van.

2 móddunk is van erre:

$$\psi_{\pm}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = A\left[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)\right]$$

→ Az elmélet tehát kétféle ~~azonos~~ identikus részecskét engedélyez.

⊕ előjelűek: bozonok (fotonok, mezonok)

⊖ előjelűek: fermionok (proton, elektron)

→ A relativisztikus kvantummechanikában bizonyítható a most axiomaként kezelt állítás.

Minden egész spinű részecske bozon és minden feles spinű részecske fermion.

→ Fentiekből következik, hogy két identikus fermion nem foglalhatja el ugyanazt az állapotot. Ha $\psi_a = \psi_b$, akkor

$$\psi_-(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = A\left[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2) - \psi_a(\vec{r}_2)\psi_a(\vec{r}_1)\right] = 0$$

→ így hullámfüggvény nélkül maradunk. Ez a híres Pauli-féle kizárási elv.

→ Az eddigiekben feltételeztük, hogy az egyik részecske ψ_a, a másik ψ_b állapotban van, de ennél van egy általánosabb (és jóval szofisztikáltabb) tárgyalásmód is:

↳ Definiáljunk egy P kicserélő operátort, ami kicseréli a két részecskét:

$$Pf(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = f(\vec{r}_2,\vec{r}_1) \quad \rightarrow \text{ természetesen } P^2 = 1, \text{ sajátértéke } \pm 1$$

→ Ha két részecske identikus, a Hamilton operátorunk ugyanúgy kell kezelnie őket: $m_1 = m_2$ és $V(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = V(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$. Ebből következik, hogy

$$[P, H] = 0$$

→ Így találhatunk egy olyan ~~fü~~ teljes függvényrendszert, mely szimultán sajátfüggvény mindkettőnek. Azaz találhatunk olyan megoldásokat a Schrödinger-egyenletre melyek vagy szimmetrikusak (+1 sajátértékű) vagy antiszim-

Egyértelműen szimmetrikusak (-1 sajátértéke) a felcserélésre:

$$\boxed{\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \pm\,\psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)}$$

→ Ha egy rendszer ilyen állapotból indul, végig benne is marad.

→ Eszerint identikus rendszerre a hullámfüggvénynek fel kell elégítenie a fenti egyenletet. ⊕ az előjel a bozonokra, ⊖ fermionokra

<u>A Spin szerepe</u>: Az elektronok teljes állapota a spinor-t is tartalmazza, nem csak a térbeli koordinátát hullámfüggvényét. Mivel annak valószínűsége, hogy a spint ↑ vagy ↓ állapotban találjuk független a térben elfoglalt pozíciójától, a teljes állapot

$$\psi(\vec{r})\,\chi(\vec{s})$$

→ Amikor két elektronállapotot rakunk ösze, ennek az egésznek kell szimmetrikusnak v. antiszimmetrikusnak lennie a felcserélésre nézve.

→ A szinglet konfiguráció antiszimmetrikus, míg a triplet állapotok szimmetrikusak (→ így antiszimmetrikus térbeli hullámfüggvényhez tartoznak)

→ A singlet állapot kötést eredményez, míg a triplet anti-kötést. A kovalens kötés létrejöttéhez a két elektronnak singlet állapotban kell lennie.
(Pauling-ot fogalmazva ilyenkor azt mondjuk, hogy az egyik ↑, a másik ↓ állapotban kell hogy legyen, de ne felejtsük, hogy ez a triplet állapotban (m=0) is teljesülhet!

Periódusos rendszer

Griffiths → 214. oldal

Helyeg: Első közelítésben az önálló elektronok hidrogén állapotokat foglalnak el → pályáknak nevezzük.

$n=1$ → K héj
$n=2$ → L héj
⋮ M
N
⋮

Alhéjak:
$l=0$ – s „sharp"
$l=1$ – p „principal"
$l=2$ – d „diffuse"
$l=3$ – f „fundamental"
$l=4$ – g
$l=5$ – h
↳ i, k, l, m (j kimarad)

18 → Kálium