

Identični delci v kvantni mehaniki

Delce lahko med seboj ločimo, če imajo različne fizikalne lastnosti, na primer maso, električni naboj, spin. Delci z različnim električnim nabojem se v električnem ali magnetnem polju gibljejo po različnih tirnicah in jih lahko ločimo. Prav tako lahko z gibanjem ločimo delce, ki imajo različno maso. Če povzamemo lahko med seboj ločimo delce z merjenjem relevantnih lastnosti, po kateri se razlikujejo. Če pa so delci identični, jih na ta način ne moremo razlikovati. Vsi elektroni imajo enako maso, enak naboj, enak spin, tako da jih med seboj ne moremo ločiti, ker imajo vse te lastnosti enake. Prav tako na takšen način ne moremo med seboj ločiti molekul vode, molekul vodika itd. Vendar pa imamo v tem primeru še vedno možnost, da ločimo delce in sicer če jih opazujemo, kako se gibljejo, se pravi, če spremljamo njihovo trajektorijo gibanja. Če lahko ob nekem času identificiramo položaj posameznih delcev in določimo, kako se gibljejo ter v nadaljevanju vedno natančno določimo položaj delcev, lahko ves čas z gotovostjo vemo, kateri delec je kateri. V kvantni mehaniki pa imamo pri tem težavo, saj zaradi Heisenbergovega principa položaja in hitrosti delcev ne moremo natančno poznati. Vse, kar lahko poznamo o delcih, je njihova valovna funkcija, ki nam poda verjetnostno gostoto za položaj posameznega delca na določenem kraju. V časovnem razvoju pa se valovne funkcije začnejo spreminjati in prekrivati. Ko se zgodi prekritje dveh valovnih funkcij, z meritvami ne moremo več določiti, kateri položaj pripada kateremu delcu. Se pravi, da delci niso več ločljivi. Zaradi tega posameznim delcem namreč ne moremo določiti ob vsakem trenutku njihovega položaja, ker bi tedaj natanko poznali tako položaj kot hitrost in s tem gibalno količino. Zato delcem ne moremo slediti. V kvantni mehaniki imamo opraviti z nerazločljivimi delci, to pa pomeni, da mora biti verjetnostna gostota večdelčne valovne funkcije neodvisna glede na zamenjavo dveh enakih delcev.

$$\rho(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = \rho(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots)$$

To je osnovna razlika med klasičnim in kvantnim sistemom, ki vsebujejo identične delce. V kvantnem sistemu moramo rešitev (valovno funkcijo) definirati na način, da nerazločljivost delcev upoštevamo eksplicitno. To pomeni, da mora biti valovna funkcija takšna, da merski rezultati niso odvisni od indeksov, ki jih določimo posameznim delcem iste vrste. Ta lastnost vodi do pomembnih efektov, katerih nimamo v klasični fiziki, saj je nerazločljivost prisotna samo v kvantni mehaniki. Videli smo, da mora biti verjetnostna gostota neodvisna od tega, kako določimo indekse posameznim delcem iste vrste. Ker pa je verjetnostna gostota izračunana kot kvadrat absolutne vrednosti valovne funkcije mora veljati

$$\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) \psi^*(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = \psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) \psi^*(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots)$$

Ta enačba pa je izpolnjena le v primeru, če se valovni funkciji pri zamenjavi dveh delcev razlikujeta za kompleksno število, katerega absolutna vrednost je 1

$$\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = e^{i\alpha} \psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots)$$

Definirajmo sedaj operator zamenjave delca i in j s \hat{P}_{ij} . Ta operator zamenja indeksa delcev v valovni funkciji

$$\hat{P}_{ij} \psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = \psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) = e^{i\alpha} \psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots)$$

Dvojna zamenjava pa nam vrne nazaj isto funkcijo

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = e^{2i\alpha}\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = \psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots)$$

To je možno le v primeru, če je $e^{i\alpha}$ enako 1 ali -1. V primeru, če je $e^{i\alpha}$ enak 1, imamo funkcijo simetrično glede na zamenjavo dveh delcev. To pomeni, da je funkcija enaka kot v primeru pred zamenjavo. V primeru, ko je $e^{i\alpha}$ enak -1, pa govorimo o asimetrični funkciji glede na zamenjavo. Tukaj funkcija ob zamenjavi spremeni predznak. Simetrično funkcijo glede na zamenjavo imajo bozoni (foton, pion, kaon, helijevo jedro itd). Bozoni imajo celoštevilski spin in jih opisuje Bose-Einsteinova statistika. Antisimetrična funkcija pa opisuje stanje fermionov, ki so delci s polovičnim spinom (elektron, mion, proton, nevtron itd) in jih opisuje Fermi-Diracova statistika. Razlika med bozoni in fermioni je še v dejstvu, da fermioni lahko zasedajo eno stanje posamezno, medtem ko je pri bozoni lahko več delcev z istim stanjem (istimi vsemi kvantnimi števili). Sedaj se pogledjmo primer za sistem, ki vsebuje dva identična delca. V Hamiltonovem operatorju delce zaradi lažjega reševanja oštevilčimo in dobimo za rešitev valovno funkcijo, ki je odvisna od koordinat obeh delcev

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(1,2)$$

Ta funkcija ne ustreza zahtevi po simetričnosti oziroma antisimetričnosti. Če indeksa 1 in 2 v Hamiltonovem operatorju zamenjamo, pa dobimo novo rešitev

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \psi(2,1)$$

ki tudi ne izpolnjuje zahtev, ima pa isto energijo kot prva funkcija. Predpostavimo sedaj, da sta obe funkciji ($\psi(1,2)$, $\psi(2,1)$) normirani. Sedaj lahko naredimo linearno kombinacijo omenjenih funkcij in dobimo simetrično ter antisimetrično funkcijo

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi(1,2) + \psi(2,1))$$

$$\psi_a(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi(1,2) - \psi(2,1))$$

Simetrična funkcija je rešitev v primeru, če delca v našem sistemu bozona, antisimetrična pa, če sta fermiona. Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ je zaradi zahteve po normalizaciji funkcije. Tako simetrična kot antisimetrična funkcija ustrežata enakima energijama kot funkciji, iz katerih sta sestavljeni. To se pravi, da je ta energija za sistem dveh delcev dvakrat degenerirana. Temu pojavu rečemo tudi degeneracija zaradi zamenjave, ker je degeneracija posledica zahteve po zamenjavi delcev. Sedaj naš primer še malo posplošimo in predpostavimo, da lahko valovno funkcijo $\psi(1,2)$ zapišemo kot produkt enodelčnih valovnih funkcij

$$\psi(1,2) = \phi_1(1)\phi_2(2)$$

Simetrično funkcijo lahko zapišemo kot

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(1)\phi_2(2) + \phi_2(1)\phi_1(2))$$

ter antisimetrično kot

$$\psi_a(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(1)\phi_2(2) - \phi_2(1)\phi_1(2))$$

Leta 1925 je Pauli postavi Paulijev izključitveni princip, ki pravi, da v večelektronskem sistemu (atomu, molekuli itd) ne moreta imeti dva elektrona vse kvantnih števil enakih. To pomeni, da ista valovna funkcija ne more opisovati dveh elektronov. Poglejmo si sedaj, kaj se zgodi, če želimo imeti dva elektrona v istem stanju, seveda pa mora biti njuna valovna funkcija antisimetrična glede na zamenjavo.

$$\psi_a(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(1)\phi_1(2) - \phi_1(1)\phi_1(2)) = 0$$

Vidimo, da je valovna funkcija identično enaka 0. To pomeni, da takšno stanje ne more obstajati. Pri simetrični funkciji tega problema nimamo, ker je lahko več bozonov z isto valovno funkcijo

$$\psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(1)\phi_1(2) + \phi_1(1)\phi_1(2)) = \frac{2}{\sqrt{2}}\phi_1(1)\phi_1(2)$$

Če si sedaj ponovno pogledamo antisimetrično funkcijo vidimo, da jo lahko zapišemo v obliki determinante

$$\psi_a(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_1(2) \\ \phi_2(1) & \phi_2(2) \end{vmatrix}$$

kjer nam stolpec pomeni številko delca in vrstica številko valovne funkcije. To determinanto imenujemo Slaterjeva determinanta in jo lahko posplošimo za zapis valovna funkcije s pravo simetrijo za fermione

$$\psi(1,2,\dots,n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \dots & \phi_1(n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_n(1) & \dots & \phi_n(n) \end{vmatrix}$$

Slaterjeva determinanta poskrbi, da se ob zamenjavi dveh delcev spremeni predznak valovne funkcije (determinanta spremeni predznak, če zamenjamo dva stolpca) ter da je enaka 0, če želimo, da bi dva delca imela enaki valovni funkciji (determinanta je enaka 0, če sta dve vrstici enaki). Simetrično funkcijo pa dobimo z razvojem Slaterjeve determinante in potem vsem členom z minusom spremenimo minus v plus.