ΔΙΑΛΕΞΕΙΣ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΦΘΙΝΟΠΩΡΟ 2004

I. Κβαντική Θεωρία Πολλών Σωμάτων

Κ Ν. Παπανικόλας
Πανεπιστήμιο Αθηνών

Περίληψη

Η ενότητα που ακολουθεί δίνει στοιχεία κβαντομηχανικής πολλών σωμάτων τα οποία είναι αναγκαία στην θεωρητική εμπέδωση της κλασικής πυρηνικής θεωρίας. Η θεωρία αναπτύσσεται σε όλη της την γενικότητα, χωρίς να εξειδικεύεται στην περίπτωση των νουκλεονίων. Το θεώρημα σπιν και στατιστικής όπως και η προσέγγιση μέσου πεδίου παρατίθενται τόσο για μποζονικά όσο και για φερμιονικά συστήματα. Δίδονται παραδείγματα τόσο απο την ατομική όσο και την πυρηνική φυσική.

Κβαντομηχανική Πολλών Σωμάτων

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι να εμπεδώσει τα βασικά στοιχεία της κβαντομηχανικής πολλών σωμάτων, να εισαγάγει μια σειρά απο έννοιες και προσεγγίσεις και γενικά μια μεθοδολογία για την επίλυση προβλημάτων που αφορούν πολλά ($2 < N \leq \infty$) αλληλεπιδρώντα σώματα. Οι έννοιες και η μεθοδολογία που θα αναπτύξουμε βρίσκει εφαρμογή σε πολλές περιοχές της φυσικής όπως στην ατομική και μοριακή φυσική, κατ εξοχήν στην φυσική της συμπυκνωμένης ύλης και βέβαια στην πυρηνική φυσική.

Η μεθοδολογία που θα αναπτύξουμε είναι αυστηρή και πλήρης στο πλαίσιο της κλασικής (μή σχετικιστικής) κβαντομηχανικής θεωρίας. Όπως και στην κλασική κβαντομηχανική θεωρία, η αλληλεπίδραση περιγράφεται με την χρήση δυναμικών, $V_{a,b,c...}(\vec{r_1}, \vec{r_1}...)$, μαθηματικές συναρτήσεις που μπορεί να είναι ιδιαίτερα περίπλοκες, μπορεί να εξαρτώνται απο μια πληθώρα κβαντικών αριθμών a,b,c..., όπως το σπίν, την γωνιακή στροφορμή κλπ. αλλά όχι απο τον χρόνο. Αυτό δέν σημαίνει ότι δεν μπορούμε να εισαγάγουμε κινηματικές σχετικιστικές διορθώσεις - αντίθετα. Ο βασικός περιορισμός που έχουμε, είναι η δυναμική σχετικότητα: ότι ο αριθμός των σωμάτων του συστήματος μας είναι σταθερός (Ν)- δεν έχουμε δηλαδή στην πορεία της εξέλιξης του συστήματος δημιουργία και καταστροφή ζευγών σωματίων και αντισωματίων. Εξάιτίας του περιορισμού αυτού το δυναμικό αυτό πλάισιο δέν μπορεί να εφαρμοστεί σε συστήματα όπου η προαναφερθείσα συνθήκη δεν ισχύει.

Κλασική Πυρηνική Θεωρία

Στην μελέτη των πυρηνικών φαινομένων κατα κανόνα είμαστε αντιμέτωποι με περίπλοκα συστήματα πολλών σωμάτων με ισχυρές αλληλεπιδράσεις ανάμεσα τους. Είναι απο τα πιο σημαντικά επιτεύγματα της ανθρώπινης γνώσης ότι έχουμε επιτύχει την περιγραφή των πιο σύνθετων και εντυπωσιακών γεγονότων του σύμπαντος, των πυρηνικών φαινομένων, με την χαρτογράφηση όλων των πυρηνικών συστατικών στον χάρτη νουκλιδίων. Ο χάρτης αυτός μας ταξινομεί όλους τους ατομικούς πυρήνες με μόνο δύο δείκτες: τον αριθμό πρωτονίων και τον αριθμό νετρονίων. Δεδομένου μάλιστα, ότι τόσο το πρωτόνιο , όσο και το νετρόνιο τα θεωρούμε σαν το ίδιο σωμάτιο, **το νουκλεόνιο**, το επίτευγμα αυτό γίνεται ακόμη πιο σημαντικό: συνθέτουμε όλους τους ατομικούς πυρήνες απο ένα και μόνο σωμάτιο.

Στην ανάπτυξη της πυρηνικής θεωρίας, έχουμε έτσι να συνθέσουμε τους ατομικούς πυρήνες και γενικότερα όλα τα πυρηνικά συστήματα, απο ένα σωμάτιο, το νουκλεόνιο. Η απλοποίηση αυτή βοηθά με εξαιρετικό τρόπο το έργο μας.

Σύστημα Ν Σωμάτων

Αν το σύστημα που θέλουμε να μελετήσουμε αποτελείται απο Ν ταυτόσημα σωμάτια (π.χ. ο πυρήνας μολύβδου ^{208}Pb, αποτελούμενος απο 208 νουκλεόνια) τότε σύμφωνα με την κβαντομηχανική, όλες του οι ιδιότητες συνοψίζονται απο την κυματοσυνάρτηση $\Psi(1, ..., N)$. Τους δείκτες $i = 1..j..N$ τους κατανοούμε να αναπαραστούν τα διανύσματα στον χώρο Hilbert $j = \vec{r_j}, \vec{p_j}, ..., \vec{s_j}, ..$ που αντιστοιχούν για κάθε ένα απο τα σωμάτια και περιλαμβάνουν όλους τους κβαντικούς αριθμούς που προσδιορίζουν τις ιδιότητες κάθε σωματίου j.

Το σύστημα περιγράφεται από κυματοσυνάρτηση $\Psi(1, ..., N)$ και έχει ενεργειακό φάσμα E_n που δίνεται από την εξίσωση Schrödinger

$$H\Psi = E_n\Psi$$

η δε χρονική εξέλιξη του συστήματος δίνεται από

$$H\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

Σπίν και Στατιστική

Απο τα πιο αξιοσημείωτα κβαντικά φαινόμενα είναι η εντελώς διαφορετική συμπεριφορά αλληλεπιδρώντων σωματίων με ακέραιο (μποζόνια) η με ημιακέραιο σπιν (φερμιόνια). Η διαφορά αυτή μπορεί να διακριθεί με την συμπεριφορά του συστήματος στην ανταλλαγή των (ταυτόσημων) σωμάτων που το συνθέτουν.

Ας ορίσω τους τελεστές μετάθεσης $M = M_{1,2,i..j,.N}$ και M_{ij} σαν τους τελεστές που δρουν στα σωμάτια του συστήματος μας και τα εναλλάσσουν. Ο τελεστής M_{ij} παίρνει το σωμάτιο που χαρακτηρίζεται απο το άνυσμα i στον χώρο Hilbert και του δίνει τις ιδιότητες του σωματίου που χαρακτηρίζεται απο το άνυσμα j και αντίστροφα. Ο γενικευμένος τελεστής M επιφέρει μεταθέσεις όλων των σωματίων. Μαθηματικά, οι τελεστές αυτοί δρώντας στην κυματοσυνάρτηση μας, μας δίνουν:

$$M_{ij}\Psi(1, ..i, j., N) = \Psi(1, .j, i.., N)$$

καί

$$M\Psi(1, ..., N) = \Psi(M1, M2, ..Mj.., MN)$$

όπου Mj είναι η νέα θέση του j. Λόγω της ταυτότητας των σωματίων, πρέπει να έχουμε:

$$H[M\Psi] = M[H\Psi],$$

δηλαδή η κυματοσυνάρτηση $M\Psi(1, ..., N) = \Psi(M1, M2, ..Mj.., MN)$ είναι και αυτή λύση της εξίσωσης Schrödinger. Απλή απαρίθμηση μας δείχνει ότι έχουμε N! τέτοιες λύσεις.

Πρέπει να παρατηρήσουμε ότι αν το σύστημα μας βρεθεί σε μιά απο αυτές τις συγκεκριμένες πιθανές λύσεις, η συγκεκριμένη κυματοσυνάρτηση θα συνεχίσει να το περιγράφει για πάντα μιά και

$$[H, M] = 0 \qquad \& \qquad H\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

και επομένως το σύστημά μας εξελίσσεται συνεχώς και σε μικρά βήματα.

Η διατήρηση της πυκνότητας $\Psi\Psi^* = (M\Psi)(M\Psi^*)$ μας αναγκάζει να δεχτούμε ότι πρέπει να ισχύει: $M\Psi = \pm\Psi$.

Μπορούμε να επιλέξουμε $M_{ij}\Psi = \pm\Psi$ όπου η επιλογή $\pm$ να εξαρτάται απο τις συγκεκριμένες τιμές των δεικτών ij. Είναι όμως πειραματικά αποδεδειγμένο ότι η φύση επιλέγει πάντα μία απο τις περιπτώσεις (+) ή (-) ανεξάρτητα απο τους δείκτες ij. Είναι πειραματικά επιβεβαιωμένο με τεράστια ακρίβεια ότι η φύση ανάμεσα σε όλες τις πιθανές επιλογές της συμμετρίας ανταλλαγής των κυματοσυναρτήσεων που περιγράφουν συστήματα τα οποία αποτελούνται απο διακριτά συστατικά (σωμάτια) δείχνει την ακόλουθη καθοριστική προτίμηση:

- Για σωμάτια με ακέραιο σπίν η κυματοσυνάρτηση είναι πλήρως συμμετρική $\lambda = +1$. Τα σωμάτια αυτά αποκαλούνται μποζόνια και υπακούουν την στατιστική Bose - Einstein.
- Για σωμάτια με ημιακέραιο σπίν η κυματοσυνάρτηση είναι πλήρως αντισυμμετρική $\lambda = -1$. Τα σωμάτια αυτά αποκαλούνται φερμιόνια και υπακούουν την στατιστική Fermi - Dirac.

Ο νόμος αυτός έχει επιβεβαιωθεί για όλες τις γνωστές αλληλεπιδράσεις (με εξαίρεση την κβαντική βαρύτητα). Δεδομένου ότι τα νουκλεόνια έχουν σπιν $\frac{1}{2}$, είναι δηλαδή φερμιόνια, θα πρέπει να μεριμνήσουμε ότι οι κυματοσυναρτήσεις που θα προκύψουν, να είναι αντισυμμετρικές.

Είναι προφανές ότι η αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση (για φερμιόνια), περικλείει και την απαγορευτική αρχή του Pauli: Αν,

$$M_{ij}\Psi(1, ..i, j., N) = \Psi(1, .j, i.., N) = -\Psi(1, ..i, j., N)$$

τότε αν $i = j \longrightarrow \Psi(1, .i, j.., N) = -\Psi(1, ..i, j., N)$ και αναγκαστικά τότε

$$\Psi(1, ..i, j., N) = 0$$

.

Κυματοσυναρτήσεις κοινών στην φύση συστημάτων, κατα κανόνα αναφέρονται σε σωμάτια διαφορετικών τύπων ταυτόχρονα που συνθέτουν το σύστημα λ.χ. πιονίων, πρωτονίων και νετρονίων. Τότε η πιο πάνω συμμετρία ισχύει ξεχωριστά για κάθε τύπο σωματίου. Καμμιά συμμετρία δεν ισχύει για ανταλλαγές διαφορετικών τύπων σωματίων.

Υπολογισμός Κυματοσυναρτήσεων

Αν έχουμε N αλληλεπιδρώντα σώματα τότε το σύστημα μας έχει δυναμική συμπεριφορά που διέπεται από την Χαμιλτονιανή $H(1, 2, ..., N)$.

όπου

$$H = H_o + H_I$$

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m}\sum_i \nabla_i^2 + \sum_i V_i$$

$$H_I = \sum_{i\leq j} V_{ij} + \sum_{i\leq j\leq k} V_{ijk} + ... + \sum_{i\leq j\leq k...\leq N} V_{ijk...N}$$

Το μέρος της χαμιλτονιανής H_I που περιγράφει την αλληλεπίδραση μεταξύ των σωματίων, γενικά είναι εξαιρετικά περίπλοκο. Η ταξινόμηση των όρων, όπως έγινε στην πιο πάνω εξίσωση είναι πλήρης αλλά και μεθοδολογικά πολύ σημαντική. Μπορούμε να διακρίνουμε την αλληλεπίδραση του σωματίου με ένα κεντρικό ή μέσο πεδίο στον όρο V_i, την αλληλεπίδραση σωματίου - σωματίου στον όρο V_{ij}, την αλληλεπίδραση τριών σωμάτων στον όρο V_{ijk} κοκ.

Έχοντας λύσει την εξίσωση Schrödinger και έχοντας βρει την κυματοσυνάρτηση $\Psi(1, ..., N)$, την πλήρη κυματοσυνάρτηση N σωμάτων, έχουμε ουσιαστικά επιτύχει τον στόχο μας. Όπως στην κβαντομηχανική του ενός σώματος δεν έχουμε παρά να εφαρμόσουμε τους αναγκαίους τελεστές για να υπολογίσουμε τις αναμενομένες τιμές (λ.χ. κατανομής φορτίου) και να τις συγκρίνουμε με τις παρατηρούμενες (πειραματικές) τιμές.

Παρόλο που το πλαίσιο που περιγράψαμε πιο πάνω είναι απλό και εξαιρετικά κομψό, είναι υπολογιστικά εφιαλτικά περίπλοκο. Ακόμη και με την χρήση των πιο ισχυρών υπολογιστών, τα συστήματα για τα οποία μπορεί να υπολογιστεί η πλήρης κυματοσυνάρτηση είναι πολύ λίγα (για N πολύ μικρό). Βέβαια η πολυπλοκότητα των εξισώσεων που πρέπει να λυθούν εξαρτάται άμεσα απο την πολυπλοκότητα των δυναμικών τα οποία θέλουμε να αξιοποιήσουμε. Στην ατομική και μοριακή φυσική, όπου τα δυναμικά είναι απλά (λ.χ. δυναμικό Coulomb ή Lennard- Jones) ο αριθμός των συστημάτων που μπορούν να υπολογισθούν είναι μεγαλύτερος απο ότι στην πυρηνική φυσική όπου τα δυναμικά είναι εξαιρετικά περίπλοκα (λ.χ. δυναμικό Παρισιού ή δυναμικό Argonne). Για τον λόγο αυτό είναι εξαιρετικά σημαντικό να αναζητήσουμε προσεγγιστικές λύσεις στο πρόβλημα μας ώστε να μπορέσουμε να έχουμε ένα δυναμικό πλαίσιο υπολογισμού συστημάτων κεντρικού ενδιαφέροντος όπως αυτό τον βαρειών πυρήνων ή ατόμων.

Ρεαλιστικά Δυναμικά

Ένα απο τα μεγάλα και ανοικτά προβλήματα στην πυρηνική φυσική είναι ο προσδιορισμός των δυναμικών που θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν στην επίλυση της εξίσωσης N σωμάτων. Σήμερα αδυνατούμε να προσδιορίσουμε τα δυναμικά αυτά, ούτε καν την μορφή τους, με αφετηρία το καθιερωμένο πρότυπο.

Η θεμελειακή αυτή ανάγκη γνώσης των δυναμικών αυτών οδήγησε στην ανάπτυξη μιας ιδιαίτερα περίπλοκης φαινομενολογίας η οποία κάνει χρήση των συμμετριών που μας είναι γνωστές, ορισμένων πεδιοθεωρητικών υπολογισμών και προσαρμογή σε πειραματικά δεδομένα για να προσδιορίσει τα δυναμικά αυτά.

Αλληλεπίδραση Νουκλεονίου - Νουκλεονίου: NN potential

Η μελέτη του δέσμιου συστήματος του Δευτερίου όπως και των αλληλεπιδράσεων μή δέσμιων συστημάτων πρωτονίου - πρωτονίου, νετρονίου - πρωτονίου και νετρονίου - νετρονίου οδήγησε σε μια εξαιρετικά καλή γνώση της αλληλεπίδρασης Νουκλεονίου - Νουκλεονίου (NN).

Τα δυναμικά αυτά που προκύπτουν είναι περίπλοκα και υπολογιστικά δύσχρηστα. Διακρίνονται απο το θεωρητικό πλαίσιο στο οποίο προσαρμόσθηκαν. Συνήθως ονομάζονται απο το όνομα της πόλης ή του εργαστηρίου στην οποία η θεωρητική ομάδα η οποία τα επεξεργάστηκε εδρεύει. Έτσι έχουμε τα δυναμικά της Βόννης (Bonn), του Παρισιού(Paris), του Nijmegen και του Argonne.

Σύγχρονα ρεαλιστικά δυναμικά Νουκλεονίου - Νουκλεονίου (NN), είναι περίπλοκα ώστε να μπορούν να περιγράψουν τα ακριβή πειραματικά δεδομένα. Μια τυπική δόμηση τέτοιων δυναμικών είναι και η ακόλουθη:

$$V_{ij} = \sum_{p=1,n} u_p(r_{ij}) O_{ij}^p$$

όπου $r_{ij} = \vec{r_i} - \vec{r_j}$ είναι η απόσταση ανάμεσα στα δύο νουκλεόνια και $u_p(r_{ij})$ η συνάρτηση που περιγράφει την χωρική συμπεριφορά της αλληλεπιδρασης τους. Αν αυτή μπορεί να αποδοθεί σε ανταλλαγή μποζονίων (λ.χ. πιονίων) θα αναμένουμε να έχει την μορφή Yukawa:

$$u_p(r_{ij}) = Y(r_{ij}) = \frac{1}{\mu r_{ij}} \exp\left(-\mu r_{ij}\right)$$

n είναι ο αριθμός των τελεστών O_{ij}^p που απαιτούνται για την ικανοποιητική περιγραφή των δεδομένων. Χρειάζονται τουλάχιστον οκτώ τέτοιοι τελεστές για να δοθεί ικανοποιητική περιγραφή του δευτερίου και των ελαστικών NN δεδομένων σκέδασης. Η πιο σύνηθης επιλογή είναι η ακόλουθη:

$$O_{ij}^{p=1.8} = 1, \tau_i \cdot \tau_j, \sigma_i \cdot \sigma_j, (\sigma_i \cdot \sigma_j)(\tau_i \cdot \tau_j), S_{ij}, S_{ij}(\tau_i \cdot \tau_j), \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}(\tau_\mathbf{i} \cdot \tau_\mathbf{j})$$

Αλληλεπίδραση τριών Νουκλεονίων: NNN potential

Ρεαλιστικά δυναμικά τριών σωμάτων είναι απαραίτητα (πέραν αυτού των δύο σωμάτων) για την περιγραφή των ιδιοτήτων συστημάτων τριών νουκλεονίων (λ.χ.^{3}He ή ^{3}H) και βαρειών πυρήνων. Πρέπει να τονίσουμε ότι το δυναμικό τριών σωμάτων δεν μπορεί να αντικατασταθεί απο δυναμικά δύο σωμάτων που διαδοχικά δρούν σε μια τριάδα σωμάτων. Έχουν κι αυτά περίπλοκη δομή. Σε σχετικά μεγάλες αποστάσεις προέρχονται απο την ανταλλαγή πιονίων ανάμεσα σε τρία νουκλεόνια, με την ενδιάμεση διέγερση ενός απο τα νουκλεόνια.

Το δυναμικό τριών σωμάτων που απαιτείται για την περιγραφή τόσο των ελαφριών όσο και των βαρειών πυρήνων έχει τουλάχιστο δύο συνιστώσες. Έχει ελκτική συμπεριφορά σε μεγάλές αποστάσεις και απωστική σε μικρές.

Προσέγγιση Μέσου Πεδίου

Η πιο απλή και ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα προσέγγιση στην πλήρη Χαμιλτονιανή H N σωμάτων είναι:

$$H \approx H_o = H_o(1) + H_o(2) + ... + H_o(n) = \sum_{j}^{N} H_o(j)$$

Στην προσέγγιση αυτή θεωρούμε ότι οι μόνοι όροι που είναι σημαντικοί (και άρα τους διατηρούμε) είναι η κινητική ενέργεια κάθε σώματος και η αλληλεπίδραση του με ένα μέσο πεδίο, το οποίο καθορίζεται ανεξάρτητα απο την κινητική και δυναμική κατάσταση των άλλων σωματίων του συστήματος.

Εξαιρετικό παράδειγμα συστήματος στο οποίο μπορούμε να εφαρμόσουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου είναι τα άτομα. Στη προσέγγιση αυτή θεωρούμε ότι η δομή του ατόμου καθορίζεται απο την ελκτική δύναμη που εξασκεί ο θετικά φορτισμένος πυρήνας στο κάθε ένα ηλεκτρόνιο ξεχωριστά, αφού λάβουμε υπ όψη την θωράκιση του φορτίου του πυρήνα απο τα ηλεκτρόνια που παρεμβάλλονται ανάμεσα στο συγκεκριμένο ηλεκτρόνιο και στο πυρήνα. Το δυναμικό αυτό, είναι ένα δυναμικό του τύπου Coulomb

$$V_i(r_i) = k\frac{Z(r)e^2}{r_i^2}\,,$$

όπου το φορτίο $eZ(r)$ του πυρήνα, το οποίο βλέπουν τα ηλεκτρόνια, μεταβάλλεται σαν συνάρτηση της ακτίνας λόγω του φαινομένου της θωράκισης. Προφανώς για το $Z(r)$ ισχύει:

$$Z(r) = \begin{cases} 1 & , \quad r \to \infty \\ Z & , \quad r \to 0 \end{cases}$$

Τότε η χαμιλτονιανή του συστήματος αυτού δεν είναι παρά η:

$$H = \sum H_o(j) = \frac{-\hbar^2}{2m}\sum_i(\nabla_i^2 + k\frac{Z(r)e^2}{r_i^2})$$

Η δραστική αυτή προσέγγιση είναι προφανές ότι αγνοεί οποιαδήποτε αλληλεπίδραση σωματίου με άλλο σωμάτιο. Για τον λόγο αυτό η πιο πάνω προσέγγιση συχνά ονομάζεται *προσέγγιση ανεξάρτητου σωματίου*

Στο παράδειγμά μας, του πολυηλεκτρονικού ατόμου, αυτό σημαίνει ότι ο όρος στην χαμιλτονιανή

$$V_{ij} = k\frac{e^2}{r_{ij}^2}$$

που δίνει την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου -ηλεκτρονίου θεωρείται αμελητέος.

Αν $\varphi_\alpha, \varphi_\beta, ...$ είναι οι κανονικοποιημένες λύσεις της H_o δηλ.

$$H_o(j)\varphi_\lambda(j) = \varepsilon_\lambda \varphi_\lambda(j)$$

τότε εύκολα μπορούμε να αποδείξουμε ότι στην προσέγγιση αυτή η λύση της εξίσωσης Schrödinger

$$H\Psi = E_n\Psi$$

γίνεται ιδιαίτερα απλή:

$$E_n = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda \qquad \& \qquad \Psi = \prod_\lambda \varphi_\lambda$$

Οι κυματοσυναρτήσεις $\varphi_\lambda(j)$ ενός σώματος λέγονται *τροχιακά*.

Έχουμε δηλαδή στην προσέγγιση αυτή την κυματοσυνάρτηση N σωμάτων να συντίθεται σαν γινόμενο των κυματοσυναρτήσεων που περιγράφουν την συμπεριφορά σωματίων σε ένα μέσο δυναμικό (πεδίο). Οι ιδιοενέργειες του συστήματος E_n δεν είναι τίποτα άλλο παρά το άθροισμα των ιδιοενεργειών του σωματίου στο μέσο δυναμικό.

Συμμετρία Ανταλλαγής στην Προσέγγιση Ανεξάρτητου Σωματίου

Δεδομένου ότι $[H, M] = 0$ έπεται ότι οποιαδήποτε λύση

$$M\Psi = \prod_\lambda M\varphi_\lambda$$

είναι αποδεκτή. Υπάρχουν N! τέτοιες λύσεις αν τα τροχιακά $\varphi_\alpha(j), ..., \varphi_\lambda(j)$ είναι όλα διαφορετικά μεταξύ τους. Έτσι συμπεραίνουμε ότι για N σώματα και για δεδομένη ιδιοενέργεια E_n η έξισωση Schrödinger στην προσέγγιση μέσου πεδίου δίνει πολλές πιθανές λύσεις.

Οι $M\Psi$ κυματοσυνασρτήσεις, αφού έχουν την ίδια ενέργεια, είναι εκφυλισμένες. Ο εκφυλισμός αυτός ονομάζεται *εκφυλισμός ανταλλαγής*. Οι διαφορετικές αυτές λύσεις έινα γενικά ασύμμετρες, αλλά μπορούμε να κατασκευάσουμε λύσεις δεδομένης συμμετρίας σαν γραμμικό συνδυασμό των πιο πάνω λύσεων. (Γνωρίζουμε απο την κβαντομηχανική ότι το άθροισμα λύσεων της εξίσωσης Schrödinger είναι και αυτή λύση). Η επιλογή της λύσης που έχει την αρμόζουσα συμμετρία που συνάδει με την φύση είναι καθοριστική.

Απο τις πολλές λύσεις που μπορούν να προκύψουν απο άθροισμα γινομένων τροχιακών, θα πρέπει να επιλέξουμε την πλήρως συμμετρική για μποζονικά συστήματα και την πλήρως αντισυμμετρική για φερμιονικά συστήματα.

Απο τις N! ανεξάρτητες λύσεις που μπορούν να προκύψουν στην ιδιαίτερα σημαντική περίπτωση όπου όλα τα τροχιακά $\varphi_\alpha(j), ..., \varphi_\lambda(j)$ είναι διαφορετικά μόνο μία λύση είναι πλήρως συμμετρική και μόνο μία είναι πλήρως αντισυμμετρική. Οι υπόλοιπες χαρακτηρίζονται απο μικτή συμμετρία.

Η πιο απλή περίπτωση αφορά την περίπτωση <u>δύο σωματίων</u>

$$\Psi_1 = \phi_\alpha(1)\phi_\alpha(2)$$

πλήρως συμμετρικό αν τα δυο σωμάτια είναι σε διαφορετικές καταστάσεις

$$\left.\begin{array}{l} \Psi_2 = \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) \\ \Psi_3 = \phi_\alpha(2)\phi_\beta(1) \end{array}\right\} \Longrightarrow \left\{\begin{array}{l} \Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_2 + \Psi_3] \\ \Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_2 - \Psi_3] \end{array}\right.$$

Μόνο στην περίπτωση του $N = 2$, η πλήρως συμμετρική και η πλήρως αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση εξαντλεί όλες τις πιθανότητες.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ: Συμμετρία Συστήματος Τριών Σωμάτων

Η περίπτωση $N = 3$ δείχνει ήδη περιπτώσεις μικτής συμμετρίας, μη αποδεκτές από την φύση. Έτσι ας εξετάσουμε την περίπτωση όπου δύο από τα τρία σωμάτια βρίσκονται στο ίδιο τροχιακό. Με βάση τους επιτρεπόμενους συνδυασμούς, αναμένουμε $3!/2! = 3$ ανεξάρτητες λύσεις. Απλή απαρίθμηση μας δίνει τις Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3. Είναι εύκολο να κατασκευάσουμε την συμμετρική κυματοσυνάρτηση Ψ_s. Είναι αδύνατο να κατασκευάσουμε πλήρως αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση Ψ_A.

$$\left.\begin{array}{l} \Psi_1 = \phi_\beta(1)\phi_\alpha(2)\phi_\alpha(3) \\ \Psi_2 = \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2)\phi_\alpha(3) \\ \Psi_3 = \phi_\alpha(1)\phi_\alpha(2)\phi_\beta(3) \end{array}\right\} \Longrightarrow \left\{ \; \Psi_s = \tfrac{1}{\sqrt{3}}[\Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3] \right.$$

Μπορούμε όμως να ορίσουμε δύο άλλες δυνατές κυματοσυναρτήσεις οι οποίες να είναι ορθοκανονικοποιημένες ως προς το Ψ_s τις:

$$\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}[2\Psi_1 - \Psi_2 - \Psi_3]$$

$$\Psi_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_2 - \Psi_3]$$

οι οποίες όμως έχουν μικτή συμμετρία.

Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι η Ψ_4 είναι συμμετρική και η Ψ_5 αντισυμμετρική στην ανταλλαγή των σωματίων 2 και 3. Μπορούμε να γράψουμε δηλαδή

$$M_{23}\Psi_4 = +\Psi_4$$

$$M_{23}\Psi_5 = -\Psi_5$$

αλλά ανταλλαγή των σωματίων 1 και 2 όπως 1 και 3 δίνει

$$M_{12}\Psi_4 = -\tfrac{1}{2}\Psi_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_5$$

προφανώς οι κυματοσυναρτήσεις Ψ_4 και Ψ_5 συγγενεύουν. Μπορούν να αναπαρασταθούν σαν μετασχηματισμοί 2×2 στον υποχώρο των Ψ_4 και Ψ_5. Η περιγραφή των ανταλλαγών με πίνακες (γραμμικούς μετασχηματισμούς) επιτυγχάνεται και κωδικοποιείται απο την θεωρία ομάδων.

Κατασκευή πλήρως συμμετρικών και αντισυμμετρικών λύσεων

Μπορούμε να κατασκευάσουμε συμμετρικές κυματοσυναρτήσεις για N σωμάτια από μια δεδομένη λύση Ψ:

$$\Psi_S = \sum_\rho \Psi(M(1,2,..N))$$

και

$$\Psi_A = \sum_\rho E_\rho \Psi(M(1,2,..N))$$

όπου $E_\rho = -1$ για μονές μεταθέσεις και $E_\rho = +1$ για ζυγές μεταθέσεις.

Στην προσέγγιση ανεξάρτητου σωματίου τότε η κυματοσυνάρτηση

$$\Psi = \prod_j \varphi = \varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2)\varphi_\gamma(3)...\varphi_N(N)$$

αποτελεί μια καλή αρχή. Οι πιο πάνω εξισώσεις μας δείχνουν ήδη τις λύσεις για (πλήρως) συμμετρικές και αντισυμμετρικές λύσεις.

Η κανονικοποιημένη αντισυμμετρική λύση Ψ_A όπου $(< \Psi_A|\Psi_A >= 1$ είναι η γνωστή ορίζουσα του Slater:

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_\alpha(1) & \varphi_\alpha(2) & \dots & \varphi_\alpha(N) \\ \varphi_\beta(1) & \varphi_\beta(2) & \dots & \varphi_\beta(N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_\lambda(1) & \varphi_\lambda(2) & \dots & \varphi_\lambda(N) \end{vmatrix}$$

Ανταλλαγή της θέσης δύο σωματίων αντιστοιχεί στην ανταλλαγή δύο κολόνων στην ορίζουσα και συνεπάγεται αλλαγή προσήμου, δηλαδή αντισυμμετρία. Παρόμοια, η ανταλλαγή τροχιακών αντιστοιχεί στην ανταλλαγή δύο σειρών στην ορίζουσα και πάλι συνεπάγεται αλλαγή προσήμου και αντισυμμετρία. Η ιδιότητα αυτή της κυματοσυνάρτησης επιβάλλει την απαγορευτική αρχή του Pauli. Αν δύο σωμάτια κατέχουν την ίδια θέση ή το ίδιο τροχιακό τοτε η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται.

Ασκήσεις

1.1 Ποιά πειραματική μαρτυρία μας δείχνει ότι ισχύει η απαγορευτική αρχή του Pauli;

1.2 Ποιά πειραματική μαρτυρία μας δείχνει ότι μποζονικά συστήματα χαρακτηρίζονται απο πλήρως συμμετρικές κυματοσυναρτήσεις;

1.3 Τι πείραμα θα προτείνατε για να διερευνήσετε την ύπαρξη κυματοσυναρτήσεων με μικτή συμμετρία;

Αναφορές

[1] Wiringa R.B. , *Reviews of Modern Physics* **65**, 231 (1993).

[2] Machleidt, *The meson theory of Nuclear Forces and Nuclear Structure in Adv. Nucl. Phys.* **19**,189-376 (1989), J. W. Negele and E. Vogt eds.