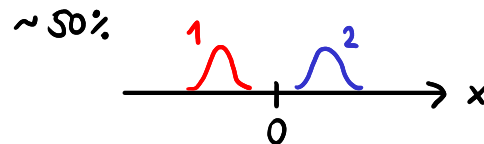
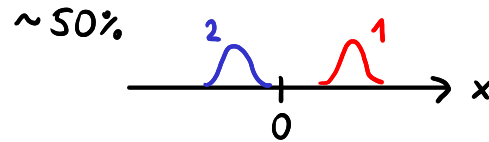
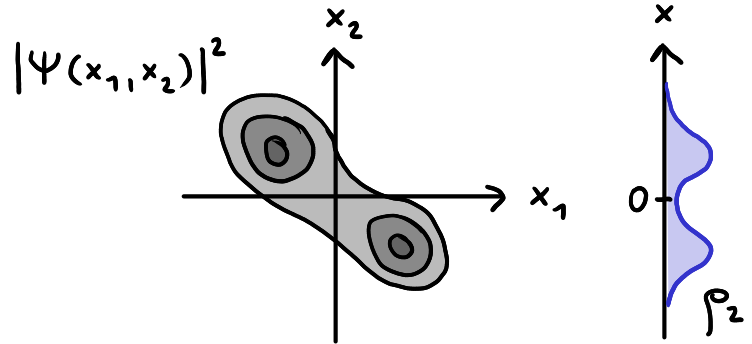
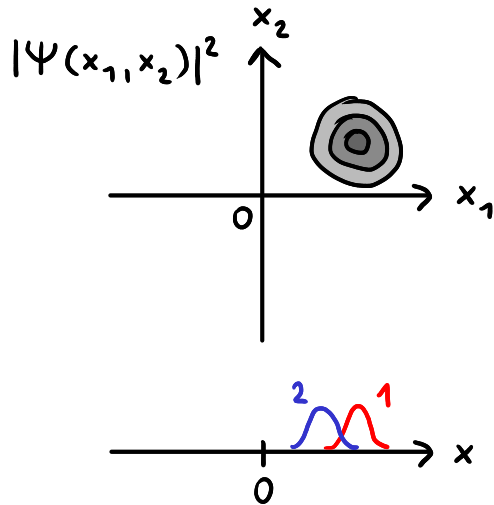


Vícečástečková vlnová funkce

$P(\text{částice 1 v intervalu } [x_1, x_1+dx_1] \text{ a zároveň}$
 $\text{částice 2 v intervalu } [x_2, x_2+dx_2]) = |\Psi(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2$



Vícečasticové operátory

Pr. atom vodíku - proton a elektron

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_{\vec{r}_p}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_e}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_p - \vec{r}_e|} \right) \Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e) = E \Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{r}_M}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_{rel}}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_{rel}|} \right) \underbrace{\chi(\vec{r}_M) \phi(\vec{r}_{rel})}_{\Psi(\vec{r}_p, \vec{r}_e)} = E \chi(\vec{r}_M) \phi(\vec{r}_{rel})$$

Pr. elektronový obal atomu hélia - dva elektrony

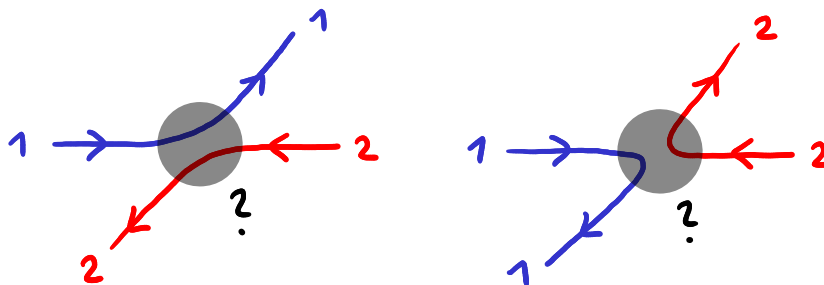
$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2}_{\text{kinetická energie}} - \underbrace{\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{\text{energie v poli jádra}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\text{vzájemné odpuzování mezi elektrony}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

kinetická energie

energie v poli jádra

vzájemné odpuzování
mezi elektrony

Nerozlišitelné / identické částice



předpoklad:

$|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2$ se nezmění při záměně souřadnic $\vec{r}_i \leftrightarrow \vec{r}_j$ identických částic

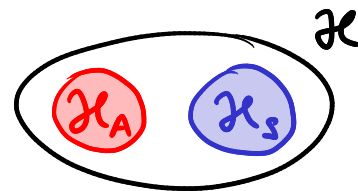
postulát o identických částicích:

Stavy identických částic jsou

bud' zcela **symetrické** (bosony)

nebo zcela **antisymetrické** (fermiony)

vzhledem k permutaci částic.



Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium.

Von Egil A. Hylleraas in Oslo.

(Eingegangen am 22. Februar 1929.)

Der Grundterm des Heliums wird nach einer neuen Methode berechnet, wobei die Übereinstimmung mit dem spektroskopisch gefundenen Wert bis ins Gebiet der Feinstruktur verfolgt werden kann. Die neue Methode besteht darin, daß man Winkelgrößen vermeidet und dafür nur metrische Abstände, die eine direkte physikalische Bedeutung haben, als unabhängige Variable verwendet. — Bei Ortho-Helium sind die Rechnungen nicht so weit geführt. Doch ist auch hier mit einfachen Mitteln ein so guter Wert erhalten, daß man mit Sicherheit auf die absolute Übereinstimmung zwischen Theorie und Erfahrung schließen darf.

Es ist eine prinzipiell äußerst wichtige Frage, ob die numerische Berechnung der Energieniveaus nach der Wellenmechanik auch bei Mehrelektronenproblemen wirklich zu exakten Ergebnissen führt. Man braucht nur an das Scheitern der klassischen Quantentheorie schon beim Zweielektronenproblem des Heliums zu erinnern, um einzusehen, daß eine solche Übereinstimmung von vornherein gar nicht selbstverständlich ist. Es sprechen zwar dafür nicht nur die glänzenden Ergebnisse der neuen Theorie in fast allen qualitativen, sowie beim Einelektronenproblem auch in quantitativen Fragen, sondern auch die folgende Tatsache. Es bestehen bei der Formulierung der Mehrelektronenprobleme nach der Wellenmechanik keine Schwierigkeiten mehr von der Art wie diejenigen, mit denen die ältere Theorie zu kämpfen hatte, und die auf der Anwendung der klassischen Mechanik beruhten. Denn die Gleichungen der Wellenmechanik sind nach bekannten mathematischen Methoden prinzipiell lösbar.

Nezávislé fermiony a Pauliho princip

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}}_{\hat{H}_1} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{\hat{H}_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

aproximace (odvažná')

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) =$ kombinace $\phi_\alpha(\vec{r}_1)$ a $\phi_\beta(\vec{r}_2)$ & spinových částí'

$$\hat{A} |\uparrow\rangle \otimes |\infty\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \otimes |\infty\uparrow\rangle - |\infty\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\hat{A} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\hat{A} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = 0$$

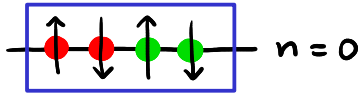
- Pauliho princip: Dva (nebo více) identické fermiony nemohou zaujmout stejný jednočásticový stav.

Struktura atomového jádra

model: protony a neutrony v harmonické'm potenciá'ln $\frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$

energie' hladiny $E = \hbar \omega (n + \frac{3}{2})$, $n = n_x + n_y + n_z$, $n_j \in 0, 1, 2, 3, \dots$

ja'dro ${}^4_2\text{He}$



$$n_x, n_y, n_z = (0, 0, 0)$$

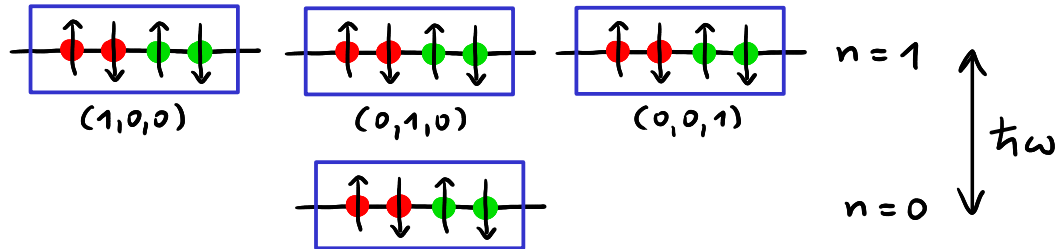
A
 Z \times

A ... nukleonove' cislo

Z ... protonove' (urcuje prvek)

$N = A - Z$... neutronove'

ja'dro ${}^{16}_8\text{O}$



$$n_x, n_y, n_z = (0, 0, 0)$$

Maria Göppert-Mayer



Born	Maria Göppert June 28, 1906 Kattowitz, German Empire
Died	February 20, 1972 (aged 65) San Diego, California, U.S.
Citizenship	Germany United States
Alma mater	University of Göttingen
Known for	Double beta decay Magic number Nuclear shell model Two-photon absorption Goeppert Mayer unit



Instead, Goeppert became interested in physics, and chose to pursue a **PhD** In her 1930 doctoral thesis^{[9][10]} she worked out the theory of possible **two-photon absorption** by atoms.^[7] Eugene Wigner later described the thesis as "a masterpiece of clarity and concreteness".^[11] At the time, the chances of experimentally verifying her thesis seemed remote, but the development of the **laser** permitted the first experimental verification in 1961 when two-photon-excited fluorescence was detected in a **europium**-doped crystal.^[12] To honor her fundamental contribution to this area, the unit for the two-photon **absorption cross section** is named the "GM". One GM is $10^{-50} \text{ cm}^4 \text{ s photon}^{-1}$.^[13] Her examiners were three **Nobel prize winners**: Max Born, James Franck and Adolf Otto Reinhold Windaus (in 1954, 1925, and 1928, respectively).^[14] With Max Born she co-authored some important works on the **lattice dynamics** of crystals.