MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Tereza Mervardová

Kombinatorika ve fyzice

Katedra didaktiky fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D.

Studijní program: Fyzika se zaměřením na vzdělávání

Studijní obor: FMUP

Praha 2023

Ráda bych poděkovala mé vedoucí bakalářské práce RNDr. Zdeňce Koupilové, Ph.D. za cenné rady a připomínky při psaní této práce a hlavně za čas, který mi věnovala. A také bych chtěla poděkovat RNDr. Petrovi Kácovskému, Ph.D. za navrhnutí tématu bakalářské práce.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V ……………… dne ……………..   …………………………………..

Název práce: Kombinatorika ve fyzice

Autor: Tereza Mervardová

Katedra: Katedra didaktiky fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D., Katedra didaktiky fyziky

Abstrakt: Hlavním cílem této bakalářské práce je pomoci čtenáři uplatnit znalosti z kombinatoriky ve fyzikálních úlohách, zejména v úlohách ze statistické fyziky. V první kapitole jsou čtenáři připomenuty základní definice a vztahy z kombinatoriky. V následující kapitole je sada úloh, která je vytvořena tak, aby se na ni později navázalo úlohami ze statistické fyziky, zejména úlohami týkajících se mikrostavů a makrostavů kvantových systémů s málo částicemi. Dále jsou v této práci úlohy využívající kombinatoriku i z jiných oblastí fyziky Tato práce také může posloužit jako sbírka úloh z vybraných částí statistické fyziky.

Klíčová slova: kombinatorika, variace, permutace, kombinace, statistická fyzika

Title: Combinatorics in Physics

Author: Tereza Mervardová

Department: Department of Physics Education

Supervisor: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D., Department of Physics Education

Abstract: The main objective of this bachelor's thesis is to help the reader apply combinatorics in physics problems, especially in problems in statistical physics. In the first chapter, the reader is reminded of combinatorial basic definitions and relations. In the following chapter, a set of problems is created in such a way that it can be followed later by problems from statistical physics, especially problems related to microstates and macrostates of quantum systems with small number of particles. Furthermore, this thesis contains problems using combinatorics in their solution from other parts of physics as well. This thesis can also be used as a collection of problems in selected topics of statistical physics.

Keywords: combinatorics, variation, permutation, combination, statistical physics

Obsah

Úvod

Cílem této bakalářské práce je vytvořit studijní text, který by pomohl čtenářům aplikovat jejich znalosti z kombinatoriky ve fyzikálních úlohách, zejména se bude jednat o úlohy ze statistické fyziky.

Při mém studium kurzu Termodynamika a statistická fyzika se ukázalo, že mi dělá problém aplikovat kombinatorické znalosti ve fyzikálních úlohách. S tímto problémem jsem se nesetkala sama, ale i mí spolužáci měli podobné obtíže. A dle zkušenosti vyučující se tyto nedostatky objevovaly i u studentů v předchozích letech. Dle výzkumů Loveruda (2009) a Olivera (2021) se ukazuje, že tato látka není problematická jen u studentů uvedeného kurzu, ale že ji pozorují vyučující i na jiných školách.

Výzkum z Univerzity v Kalifornii (Loverude, 2009) poukázal na to, že studenti mají problém s rozlišením pojmů mikrostav a makrostav. Tento problém byl zkoumán na úloze „házení mincí“. Největší problém dělalo pochopení, že každý mikrostav má stejnou pravděpodobnost, ale že pravděpodobnost makrostavů už stejná není, neboť záleží na tom, kolika mikrostavy je daný makrostav realizovaný. Podobný problém s rozlišením mikrostavu a makrostavu jsem měla při studiu i já sama. Dlouhou dobu jsem nebyla schopná si uvědomit rozdíl mezi těmito dvěma pojmy, a to se pak projevovalo při řešení úloh.

Výzkum z Univerzity v Coloradu (Oliver, a další, 2021) poukazoval na více úloh, se kterými mají studenti problém. Zabýval se například úlohou „Kolika způsoby lze posadit n studentů na m židlí, pokud $n < m$?“ anebo úlohou označenou jako „předměty v krabici“. Výzkum ukázal, že studentům dělalo problém rozlišit, kdy záleží na pořadí a kdy jsou předměty rozlišitelné. Podobnými úlohami jsme se zabývali i v našem kurzu, a i v tomto případě mohu na základě vlastní zkušenosti dát uvedenému výzkumu za pravdu. I mne samotné a mým spolužákům také ze začátku rozlišitelnost a nerozlišitelnost dělala problém.

Práce je členěna do pěti kapitol, úvodu a závěru. V první kapitole jsou čtenáři připomenuty základní kombinatorické definice a vztahy. V této kapitole jsou také matematické úlohy, ve kterých si čtenář připomenuté vztahy a koncepty může hned zkusit aplikovat.

Ve druhé kapitole čtenář nalezne vyřešenou sadu úloh, která slouží jako takový můstek mezi matematickými a fyzikálními úlohami. Úlohy jsou vytvořeny takovým způsobem, aby si čtenář později při řešení fyzikálních úloh uvědomil, že podobný problém již řešil. Jen s tím rozdílem, že tématem úlohy nebylo například umísťování rozlišitelných či nerozlišitelných částic na energetickou hladinu, ale sázení rozkvetlých či nerozkvetlých rostlinek do truhlíku.

V posledních třech kapitolách čtenář nalezne fyzikální úlohy včetně stručného souhrnu potřebné fyzikální teorie. Největší zastoupení zde mají úlohy ze statistické fyziky, které se týkají určování počtu mikrostavů a makrostavů, kanonické a grandkanonické statistické sumy, ale také zde nalezne úlohy, které se týkají například kvantové fyziky.

Všechny úlohy v této práci jsou vyřešeny. Některé úlohy jsou vyřešeny více způsoby, aby čtenář viděl, že ne vždy je potřeba problém řešit pomocí obecného vztahu a že občas je jednodušší úlohu řešit například úvahou nebo výčtem možností.

Tato práce také může být čtenářem použita jako studijní text či menší sbírka úloh vhodná pro předmět Termodynamika a statistická fyzika.

Všechny obrázky v této práci byly vytvořeny pomocí počítačového programu GeoGebra.

1. Základy kombinatoriky

Tato kapitola je zpracována na základě knih (Calda, 1996) a (Calda, a další, 2008). Všechny definice jsou doslovně převzaty z knihy (Calda, 1996) a z této knihy jsou téměř doslovně převzatá i označení. Jiné formulace definice jsou převzaty z knihy (Calda, a další, 2008).

V této kapitole si nejprve vysvětlíme, jak se k jednotlivým kombinatorickým definicím a vztahům došlo. Poté až zmíníme samostatné definice a vztahy. Následně vyřešíme úlohy, ve kterých jednotlivé vztahy budeme aplikovat. Všechny definice a vztahy jsou pro přehlednost v textu zvýrazněné rámečkem.

Kombinatorické pravidlo součinu

Za tímto kombinatorickým pravidlem se neskrývá nic složitého. Pokud budeme chtít určit počet všech možných dvojic jezdec – formule, vynásobíme mezi sebou počet jezdců a počet nabízených formulí. Například máme 5 jezdců a 10 formulí, celkem tedy máme $5 \cdot 10 = 50$ možných dvojic jezdec – formule.

Definice:

Počet uspořádaných k-tic, jejichž první člen lze vybrat n_1 způsoby, druhý člen po výběru prvního členu n_2 způsoby atd. až k-tý člen po výběru všech předchozích n_k způsoby, je roven $n_1 \cdot n_2 \cdot \ldots \cdot n_k$.

Úloha 1.1: V restauraci nabízejí 3 druhy steaků: kuřecí, vepřový a hovězí a 4 druhy příloh: hranolky, krokety, brambory a kaši. Kolik různých obědů lze z této nabídky vytvořit, pokud může být na talíři jen jeden druh masa a přílohy?

Řešení: Podle definice chceme vytvořit dvojici ($k = 2$), jejíž první člen lze vybrat 3 způsoby ($n_1 = 3$), jelikož máme tři druhy masa a druhý člen lze vybrat 4 způsoby ($n_2 = 4$), jelikož máme 4 různé přílohy. Z toho plyne, že celkem máme $n_1 \cdot n_2 = 3 \cdot 4 = 12$ možností.

Kombinatorické pravidlo součtu

Stejně jako u pravidla výše i zde platí, že kombinatorické pravidlo součtu není nic složitého. Představme si dvě závodní stáje Formule 1. Stáj Ferrari, kterou označíme písmenem F a stáj Haas, kterou označíme písmenem H a pokud nás zajímá, kolik máme možností, jak vybrat jednu formuli na reklamní plakát závodu, tak jen sečteme počet formulí ze stáje F s počtem formulí ze stáje H. Pokud například stáj F vlastní 12 formulí a stáj H vlastní 8 formulí, pak celkem máme $12 + 8 = 20$ možností, jak vybrat jednu formuli na reklamní plakát závodu.

Definice:

Jsou-li $A_1, A_2, \ldots, A_k$ konečné množiny, které mají po řadě $n_1, n_2, \ldots, n_k$ prvků, a jsou-li každé dvě disjunktní, pak počet prvků množiny $A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_k$ je roven $n_1 + n_2 + \cdots + n_k$.

Úloha 1.2: Na fotbalový kroužek ve škole chodí 9 žáků z 5.A a 7 žáků z 5.B. Kolika způsoby můžeme vybrat jednoho žáka, který půjde kopat penaltu?

Řešení: Podle definice máme dvě konečné množiny: A_1 je množina žáků z 5.A, která má 9 prvků ($n_1 = 9$), a A_2 je množina žáků z 5.B, která má 7 prvků ($n_2 = 7$), z čehož vyplývá, že jednoho žáka lze vybrat $n_1 + n_2 = 9 + 7 = 16$ způsoby.

Variace

O variace se jedná, pokud si pokládáme otázku: Kolika způsoby je možné obsadit první, druhou a třetí pozici v závodě Formule 1? Ve Formuli 1 závodí 20 závodníků. My pro tento příklad budeme předpokládat, že všech 20 závodníků má stejné formule, tedy všichni mají stejnou šanci na vítězství a obsazení dalších dvou pódiových umístění. V následujícím textu si popíšeme, jak se dojde k definici a vztahu pro variace, a pak již tuto úlohu zvládneme vyřešit.

Chceme-li určit počet všech k-členných variací z n prvků a máme-li n navzájem různých prvků a číslo $k \in \mathbb{N}$; $k \leq n$. První člen uspořádané k-tice vybíráme z n možností, tj. pro výběr prvního členu máme n možností. Pro výběr druhého členu máme $(n - 1)$ možností, protože na tomto místě nesmí stát prvek, který jsme vybrali na první místo. Pro výběr třetího členu máme $(n - 2)$ možností, protože na tomto místě nesmí stát prvek, který jsme vybrali na první a druhé místo. Tímto způsobem pokračujeme dál až dojdeme k výběru k-tého členu, pro jehož výběr máme $(n-(k-1))$ možností. Tento postup je znázorněn na schématu 1.1.

Odpověď na otázku z úvodu, kolika způsoby lze obsadit první, druhé a třetí místo v závodě Formule 1, je $20 \cdot 19 \cdot 18 = 6\,840$ způsoby.

Schéma 1.1: Znázornění postupu tabulkou

uspořádaná k-tice	1. člen	2. člen	…	$(k-1)$-ní člen	k-tý člen
možnosti výběru z n prvků	n	$n-1$	…	$n-(k-2)$	$n-(k-1)$

Podle kombinatorického pravidla součinu je počet všech uspořádaných k-tic roven součinu:

$$V_k(n) = n(n-1)\cdot \ldots \cdot \big(n-(k-1)\big) = n(n-1)\cdot \ldots \cdot (n-k+1) =$$
$$= \frac{n(n-1)\cdot \ldots \cdot (n-k+1)(n-k)(n-k-1)\cdot \ldots \cdot 2\cdot 1}{(n-k)(n-k-1)\cdot \ldots \cdot 2 \cdot 1} =$$
$$= \frac{n!}{(n-k)!}.$$

Počet uspořádaných k-tic z n navzájem různých prvků, tj. k-členných variací z n prvků. $V_k(n)$ se rovná součinu k přirozených čísel takových, že největší z nich je rovno n a každé další je o jednu menší.

Definice:

k-členná variace z n prvků je uspořádaná k-tice sestavená z těchto prvků tak, že každý se v ní vyskytuje nejvýše jednou.

To znamená, že u variací záleží na pořadí a prvky jsou navzájem různé.

Označení a výpočet:

$V_k(n)$ je počet k-členných variací z n prvků, $k \leq n$

$$V_k(n) = n(n-1)(n-2)\cdot \ldots \cdot (n-k+1) = \frac{n!}{(n-k)!}. \tag{1.1}$$

Úloha 1.3: Určete počet čtyřciferných přirozených čísel, jestliže se číslice nesmí opakovat a a) vybíráme z číslic 1, 2, 3, …, 9, b) vybíráme z číslic 0, 1, 2, 3, …, 9.

Řešení:

a) Vybíráme čtveřici z devíti prvků (číslice 1 až 9).

Nejprve úlohu vyřešíme pomocí vztahu (1.1):

$$V_k(n) = V_4(9) = \frac{9!}{(9-4)!} = \frac{5! \cdot 6 \cdot 7 \cdot 8 \cdot 9}{5!} = 3\,024.$$

Při řešení úlohy úvahou si představíme 4 místa. Na první místo vybíráme ze všech 9 číslic. Na druhé místo vybíráme z 8 číslic, protože zde nesmí být číslice, která je na prvním místě. Na třetí místo vybíráme ze 7 číslic, protože zde nesmí být číslice, které jsou na prvním a druhém místě. Na poslední místo vybíráme jen z 6 číslic, protože nesmíme použít předchozí tři číslice. Dostáváme:

$$\underline{9} \cdot \underline{8} \cdot \underline{7} \cdot \underline{6} = 3\,024.$$

1. místo 2. místo 3. místo 4. místo

b) Vybíráme čtveřici z deseti prvků (číslice 0 až 9), ale pozor na prvním místě nesmí být nula, protože by se pak nejednalo o čtyřciferné číslo.

Při řešení úlohy pomocí vztahu jsme si řešení rozdělili tak, že jsme na první pozici vybírali z 9 číslic (bez nuly), a poté jsme použili vztah (1.1), kterým jsme vybírali trojici z devíti prvků (už můžeme použít nulu, ale nesmíme použít číslici na prvním místě).

$$9 \cdot V_{k-1}(n-1) = 9 \cdot V_3(9) = 9 \cdot \frac{9!}{(9-3)!} = 9 \cdot \frac{6! \cdot 7 \cdot 8 \cdot 9}{6!} = 4\,536.$$

Tuto úlohu ještě vyřešíme úvahou. Představíme si 4 místa a uvědomíme si, že na prvním místě nesmí být nula, a proto vybíráme z 9 číslic. Na druhém místě už nula být může, ale nesmí tam být číslice, která je na prvním místě, proto vybíráme opět z 9 číslic. Na třetím místě nesmí být číslice, které jsme použili na prvním a druhém místě, proto vybíráme z 8 číslic. Na posledním místě nesmí být číslice, které jsem použili na prvním, druhém a třetím místě, proto vybíráme jen ze 7 číslic. Dostáváme:

$$9 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 7 = 4\,536.$$

Další možné řešení úvahou je takové, že vybereme všechny čtveřice, a pak odečteme počet těch, které začínají nulou. Dostáváme:

$$10 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 7 - 1 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 7 = 4\,536.$$

Permutace

O permutace se jedná, pokud se budeme ptát na otázku: Kolika způsoby lze rozmístit 20 formulí na 20 startovních pozic před závodem?

Permutace jsou uspořádané n-tice sestavené z daných n prvků ($k = n$). Počet $P(n)$ všech permutací z n prvků dostaneme tak, že do vzorce pro počet k-členných variací z n prvků za k dosadíme n. Každá permutace z daných n prvků určuje nějakou uspořádanou n-tici z těchto prvků, tj. nějaké jejich pořadí.

Definice:

Permutace z n prvků je n-členná variace z n prvků.

To znamená, že u permutací záleží na pořadí a prvky se neopakují, tj. jsou navzájem různé.

Jiná formulace definice permutace:
Permutace z n prvků je uspořádaná n-tice sestavená z těchto prvků tak, že každý se v ní vyskytuje právě jednou.

Označení a výpočet:

$P(n)$ je počet permutací z n prvků

$$P(n) = V_n(n) = n(n-1)(n-2) \cdot \ldots \cdot 2 \cdot 1 = n!\,. \tag{1.2}$$

Odpověď na otázku z úvodu, kolika způsoby lze rozestavit 20 formulí na start, je $P(20) = 20! \approx 2{,}43 \cdot 10^{18}$ způsoby.

Úloha 1.4: Určete kolika způsoby lze na pět volných sedaček v kině posadit pět dívek, jestliže a) je jim jedno vedle koho sedí a b) dvě chtějí sedět vedle sebe.

Řešení:

a) Jedná se o pětici z pěti prvků.
Nejprve úlohu vyřešíme pomocí vztahu (1.2):

$$P(n) = P(5) = 5! = 120.$$

Úlohu lze také vyřešit úvahou. Představíme si 5 sedaček. Na první sedačku vybíráme z 5 děvčat. Na druhou sedačku vybíráme ze 4 děvčat, protože zde nesmí sedět děvče, které sedí na první sedačce. Na třetí sedačku vybíráme ze 3 děvčat, protože zde nesmí sedět děvčata, která sedí na první a druhé sedačce. Na čtvrtou sedačku vybíráme ze 2 děvčat, protože zde nesmí sedět děvčata, která sedí na první, druhé a třetí sedačce. Na poslední sedačku nám zbyde jen 1 děvče, protože ostatní děvčata už na nějaké sedačce sedí. Dostáváme:

$$5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 120.$$

b) Ta děvčata, která chtějí sedět vedle sebe, budeme počítat jako jeden prvek. Z toho vyplývá, že se jedná o čtveřici ze čtyř prvků. Dvojici ale musíme započítat dvakrát, protože pokud si ta dvě děvčata označíme A a B, tak mohou sedět v pořadí AB a podruhé v pořadí BA.
Při řešení úlohy pomocí vztahu (1.2) dostáváme:

$$2 \cdot P(n) = 2 \cdot P(4) = 2 \cdot 4! = 48.$$

Při řešení úvahou si představíme sedačku o 4 místech. Stejně jako předtím teoreticky rozsazujeme děvčata, ale je potřeba si uvědomit, že pokud dvě děvčata chtějí sedět vedle sebe, tak záleží na tom, jestli sedí v pořadí AB nebo BA, a proto je potřeba násobit dvojkou. Dostáváme:

$$2 \cdot (4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1) = 48.$$

Kombinace

O kombinace se jedná, pokud nás zajímá, kolika způsoby lze z 20 závodníků Formule 1 vybrat 3 závodníky, kteří půjdou na tiskovou konferenci. V následujícím textu se seznámíme s tím, co znamená neuspořádaná n-tice, odvodíme si, jak se dojde k definici a vztahu pro kombinace, a poté již spočteme tuto úlohu.

Co znamená, pokud řekneme neuspořádaná n-tice?

Dvojice $\{A, B\}$ je totéž jako dvojice $\{B, A\}$ – je nám jedno, jestli je první A nebo B. To samé by platilo, pokud bychom měli 3 a více prvků. Jednoduše řečeno nezáleží nám na pořadí prvků.

K určení počtu všech k-členných kombinací z n prvků použijeme výsledek, který jsme odvodili pro počet všech k-členných variací z n prvků. Máme n prvků a utvoříme z nich všechny k-členné variace. Protože u variací nám záleží na pořadí prvků ve skupině, ale u kombinací nikoliv, variace rozdělíme do skupin tak, aby se všechny variace z téže skupiny lišily pouze pořadím jednotlivých prvků a každé dvě variace z různých skupin se lišily aspoň v jednom prvku. Každá takováto skupina obsahuje $k!$ uspořádaných k-tic, protože k prvků lze uspořádat $k!$ způsoby. U kombinací nám nezáleží na pořadí, a proto splyne všech $k!$ uspořádaných k-tic každé skupiny v jedinou k-tici neuspořádanou, tj. v jedinou k-členou kombinaci z n prvků. Tento proces je znázorněn na schématu 1.2. Z toho vyplývá, že počet skupin, do nichž jsme původně všechny k-členné variace rozdělili, odpovídá počtu k-členných kombinací z daných n prvků. Protože v každé skupině je $k!$ variací, platí: $C_k(n) = \frac{V_k(n)}{k!}$.

Schéma 1.2: Dvoučlenné variace ze 3 prvků a, b, c. Tučné černé šipky nám znázorňují proces, kdy nám uspořádané dvojice splynou v jednu neuspořádanou dvojici.

dvoučlenné variace z prvků a, b, c		
(a, b)	(a, c)	(b, c)
(b, a)	(c, a)	(c, b)

$$V_2(3) = 2!\,C_2(3)$$

{a, b}	{a, c}	{b, c}
dvoučlenná kombinace z prvků a, b, c		

Definice:

k-členná kombinace z n prvků je neuspořádaná k-tice sestavená z těchto prvků tak, že každý se v ní vyskytuje nejvýše jednou.

To znamená, že u kombinací nezáleží na pořadí a prvky se neopakují.

Jiná formulace definice kombinace:
k-členná kombinace z n prvků je k-prvková podmnožina n-prvkové množiny těchto prvků.

Označení a výpočet:

$C_k(n)$ je počet k-členných kombinací z n prvků

$$C_k(n) = \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!\,(n-k)!} = \frac{1}{k!}V_k(n). \tag{1.3}$$

Odpověď na otázku z úvodu, kolika způsoby lze z 20 závodníků vybrat 3 na tiskovou konferenci je $C_3(20) = \binom{20}{3} = 1140$ způsoby. Vybírali jsme trojici z 20 prvků.

Úloha 1.5: Určete, kolika způsoby lze z navzájem různých 8 červených a 6 zelených jablek vybrat 5 jablek, u nichž a) nijak nezáleží na barvě jablka, b) chceme právě 2 červená jablka a c) chceme alespoň 2 červená jablka.

Řešení:

a) Vybíráme pětici ze 14 prvků (8 červených jablek + 6 zelených jablek).
Při řešení úlohy pomocí vztahu (1.3) dostáváme:

$$C_k(n) = C_5(14) = \binom{14}{5} = \frac{14!}{5!\,(14-5)!} = \frac{14!}{5!\cdot 9!} = 2\ 002.$$

b) Prvně vybereme 2 jablka z červených jablek a zbytek (3 jablka) vybereme ze zelených jablek. Použitím vztahu (1.3) a kombinatorického pravidla součinu dostáváme:

$$C_{k_č}(n_č)\cdot C_{k_z}(n_z) = C_2(8)\cdot C_3(6) = \binom{8}{2}\binom{6}{3} = \frac{8!}{2!\,6!}\cdot\frac{6!}{3!\,3!} = 560.$$

c) Máme-li vybrat 5 jablek z nichž alespoň 2 mají být červená, tak to znamená, že právě 2 budou červená (3 budou zelená), nebo právě 3 budou červená (2 budou zelená), nebo právě 4 budou červená (1 bude zelené), anebo právě 5 jich bude červených (žádné nebude zelené). Pomocí vztahu (1.3) a kombinatorických pravidel součinu a součtu dostáváme:

$$\binom{8}{2}\binom{6}{3}+\binom{8}{3}\binom{6}{2}+\binom{8}{4}\binom{6}{1}+\binom{8}{5}\binom{6}{0}=1\,876.$$

Variace s opakováním

Variace s opakováním se od variací liší hlavně tím, že se prvky mohou opakovat, ale pořád nám bude záležet na pořadí. O variace s opakováním se jedná v případě, že chceme do 10 závodních boxů Formule 1 umístit sadu pneumatik, přičemž máme k dispozici sady od 4 různých výrobců, máme je v dostatečném množství, abychom do všech boxů mohli dát sady od jednoho výrobce, ale můžeme využít i sady od různých výrobců. V následujícím odstavci si odvodíme definici a vztah pro variace s opakováním, a poté již zvládneme vyřešit naši úvodní otázku.

Chceme určit počet všech k-členných variací s opakováním z n prvků. Nechť máme n navzájem různých prvků a číslo $k \in \mathbb{N}$. Předpokládáme, že pro každý z daných n prvků máme k dispozici dostatečný počet stejných kusů. Z toho nám poté vyplývá, že pro výběr každého členu uspořádané k-tice máme právě n možností viz schéma 1.3, tj. už nejsme závislí na tom, které prvky jsme vybrali pro předchozí členy.

Schéma 1.3: Znázornění postupu tabulkou.

uspořádaná k-tice	1. člen	2. člen	…	$(k-1)$-ní člen	k-tý člen
možnosti výběru z n prvků (každý s neomezeným počtem stejných kusů)	n	n	…	n	n

Podle kombinatorického pravidla součinu je počet uspořádaných k-tic, v nichž se každý prvek může libovolný počet krát opakovat, roven:

$$\underbrace{n \cdot n \cdot n \cdot \ldots \cdot n}_{\boxed{k\text{-krát}}} = n^k.$$

Definice:

k-členná variace s opakováním z n prvků je uspořádaná k-tice sestavená z těchto prvků tak, že každý je v ní nejvýše k-krát.

To znamená, že u variací s opakováním záleží na pořadí a prvky se opakují.

Označení:

$V'_k(n)$ je počet k-členných variací s opakováním z n prvků

$$V'_k(n) = n^k. \tag{1.4}$$

Odpověď na otázku z úvodu, kolika způsoby můžeme rozmístit sady pneumatik od 4 různých výrobců do $n = 10$ boxů, je $V'_4(10) = 10^4$ způsobů.

Úloha 1.6: Určete počet čtyřciferných přirozených čísel, jestliže se číslice mohou opakovat a a) vybíráme z číslic 1, 2, 3, …, 9, b) vybíráme z číslic 0, 1, 2, 3, …, 9.

Řešení:

a) Vybíráme uspořádanou čtveřici z devíti prvků.
Nejprve úlohu vyřešíme pomocí vztahu (1.4) a dostáváme:

$$V'_k(n) = V'_4(9) = 9^4 = 6\,561.$$

Při řešení úlohy úvahou si představíme 4 místa. Na první místo vybíráme z 9 číslic a jelikož se prvky mohou opakovat, tak na druhé, třetí a čtvrté místo také vybíráme z 9 číslic. Dostáváme:

$$9 \cdot 9 \cdot 9 \cdot 9 = 6\,561.$$

b) Musíme si dát pozor, že na prvním místě nesmí být nula, a poté už můžeme vybírat ze všech deseti číslic.
Pomocí vztahu (1.4) a kombinatorického pravidla součinu dostáváme:

$$9 \cdot V'_{k-1}(n) = 9 \cdot V'_3(10) = 9 \cdot 10^3 = 9\,000.$$

Při řešení úlohy úvahou si opět představíme 4 místa. Na první místo vybíráme z 9 číslic, nesmí zde být nula, protože by se nejednalo o čtyřciferné číslo, vybíráme tedy z číslic 1 až 9. Na druhém, třetím a čtvrtém místě už nula být může a jelikož se prvky mohou opakovat, tak vybíráme z 10 číslic, máme číslice 0 až 9. Dostáváme:

$$9 \cdot 10 \cdot 10 \cdot 10 = 9\,000.$$

Permutace s opakováním

Permutace s opakováním se od permutací liší v tom, že prvky se mohou opakovat, ale pořád záleží na pořadí. O permutace s opakováním se bude jednat, pokud nás bude zajímat kolika způsoby může mechanik Formule 1 seřadit pneumatiky, pokud má 8 pneumatik ze sady soft, 8 pneumatik ze sady medium a 4 pneumatiky ze sady hard. Pneumatiky ze stejné sady považujeme za totožné. V následujícím odstavci se na konkrétní úloze pokusíme přiblížit definici a vztah pro permutace s opakováním, a poté vyřešíme úvodní otázku.

Uvažujme teď 3 různé prvky a_1, a_2, b_1, ze kterých utvoříme všech 3! permutací a budeme zkoumat, kolik z těchto permutací se ztotožní, pokud u všech 3 prvků odstraníme indexy ($a_1 = a_2 = a, b_1 = b$), viz schéma 1.4.

Schéma 1.4: Postup hledání permutace s opakováním pro případ $n = 2$, $k_1 = 2$ a $k_2 = 1$.

Permutace ze tří prvků a_1, a_2, b_1		Permutace s opakováním ze 2 prvků a, b, z nichž se prvek a opakuje dvakrát a b jednou
(a_1, a_2, b_1), (a_2, a_1, b_1)	$\longleftrightarrow$	$\boxed{(a, a, b)}$
(a_1, b_1, a_2), (a_2, b_1, a_1)	$\longleftrightarrow$	$\boxed{(a, b, a)}$
(b_1, a_1, a_2), (b_1, a_2, a_1)	$\longleftrightarrow$	$\boxed{(b, a, a)}$

Pokud se budeme ptát, která permutace z prvků a_1, a_2, b_1 se po odstranění indexů ztotožní s permutací (a, a, b), budou to ty permutace, které mají na první a druhé pozici prvky a_1, a_2 a na třetí pozici prvek b_1. Pro umístění na těchto místech máme pro prvky a_1, a_2 právě 2! možností a pro prvek b_1 právě 1! možnost, což souhlasí se schématem 1.4 a jeho první dvojicí závorek vlevo, takže s permutací (a, a, b) splyne celkem $2! \cdot 1! = 2$ původních permutací ze 3 prvků a_1, a_2, b_1. Tímto způsobem se všech 3! permutací z daných 3 prvků a_1, a_2, b_1 rozloží do takových tříd, že v každé budou právě ty permutace, které se po odstranění indexů u daných prvků ztotožní. Každá třída odpovídá jediné permutaci s opakováním ze dvou prvků a a jednoho prvku b, tj. obsahuje $2! \cdot 1!$ permutací. Výsledný počet permutací s opakováním získáme tak, že permutaci všech tří prvků, tj. 3!, vydělíme počtem permutací v jedné třídě, tj. $2! \cdot 1!$ a dostaneme tedy $\frac{3!}{2! \cdot 1!} = 3$ permutace s opakováním. To je vidět ve schématu 1.4, kde došlo k rozložení do 3 tříd.

Definice:

Permutace z n prvků, které se opakují $k_1, k_2, \dots, k_n$ krát, je uspořádaná $(k_1 + k_2 + \dots + k_n)$-tice, v níž jsou jednotlivé prvky zastoupeny $k_1, k_2, \dots, k_n$-krát.

To znamená, že u permutací s opakováním záleží na pořadí a prvky se opakují. Jsou to uspořádané skupiny, v nichž je každý z daných n prvků – označme je $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ – zastoupen aspoň jednou, a to v předem určeném počtu: k_1-krát prvek a_1, k_2-krát prvek a_2, … , k_n-krát prvek a_n.

Jiná formulace definice permutace s opakováním:
Permutace s opakováním z n prvků je uspořádaná k-tice sestavená z těchto prvků tak, že každý se v ní vyskytuje v předem daném počtu.

Označení a výpočet:

$P'(k_1, k_2, \dots, k_n)$ je počet permutací z n prvků, které se opakují $k_1, k_2, \dots, k_n$-krát

$$P'(k_1, k_2, \dots, k_n) = \frac{(k_1 + k_2 + \dots + k_n)!}{k_1! \cdot k_2! \cdot \dots \cdot k_n!}. \qquad (1.5)$$

Odpověď na úvodní otázku, kolika způsoby může mechanik seřadit pneumatiky z různých sad, zní $P'(8,8,4) = \frac{(8+8+4)!}{8! \cdot 8! \cdot 4!} = \frac{20!}{8! \cdot 8! \cdot 4!} = 62\,355\,150$ způsoby.

Permutace bez opakování jsou zvláštním případem permutací s opakováním. Pokud je $k_1 = k_2 = \dots = k_n = 1$, vyjde nám, že $k_1 + k_2 + \dots + k_n = n$, z toho plyne, že půjde o uspořádané n-tice, v nichž je každý z n prvků právě jednou, tzn. jsou to permutace bez opakování. Dostáváme:

$$\underbrace{P'(1,1,\dots,1)}_{\boxed{n}} = \frac{(1+1+\cdots+1)!}{1!\cdot 1!\cdot\ldots\cdot 1!} = n! = P(n).$$

Počet permutací s opakováním ze 2 prvků opakujících se k-krát a $(n-k)$-krát je roven počtu k-prvkových kombinací z n prvků:

$$P'(k,n-k) = \frac{n!}{k!\,(n-k)!} = \binom{n}{k} = C_k(n).$$

Vybereme vlastně k míst pro první prvek z n možností.

Úloha 1.7: Určete, kolika způsoby je možné srovnat do řady 3 červená a 2 žlutá jinak stejná autíčka.

Řešení: Tuto úlohu vyřešíme pomocí vztahu (1.5) a dostáváme:

$$P'(3,2) = \frac{(3+2)!}{3!\cdot 2!} = \frac{5!}{3!\cdot 2!} = \frac{3!\cdot 4\cdot 5}{3!\cdot 2!} = \frac{4\cdot 5}{2} = 10.$$

Kombinace s opakováním

Kombinace s opakováním se od kombinací liší v tom, že prvky se mohou opakovat a na pořadí stále nezáleží. O kombinace s opakováním se bude jednat, pokud nás bude zajímat například otázka: Kolika způsoby lze rozdělit 20 stejných formulí mezi 10 týmů? V následujícím odstavci si odvodíme, jak se dojde k definici a vzorci pro kombinace s opakováním, a poté již budeme schopni odpovědět na otázku z úvodu.

Odvození se pokusíme ilustrovat na konkrétním příkladu, a poté tento postup zobecníme. Budeme mít čtyřčlennou kombinaci s opakováním z prvků a, b, c.

Uvedeme možné kombinace s opakováním – skupiny v nichž nezáleží na pořadí a jednotlivé prvky se mohou opakovat:

a, a, a, a	a, a, a, b	a, a, a, c	a, a, b, b	a, a, b, c
a, a, c, c	a, b, b, b	a, b, b, c	a, b, c, c	a, c, c, c
b, b, b, b	b, b, b, c	b, b, c, c	b, c, c, c	c, c, c, c

Každou tuto kombinaci s opakováním zašifrujeme pomocí uspořádané skupiny koleček a svislých čárek tímto způsobem: Budeme si představovat, že máme 3 přihrádky – první pro prvky typu a, druhou pro prvky typu b a třetí pro prvky typu c. Rozhraní mezi sousedními přihrádkami znázorníme svislou čárkou – potřebujeme 2 čárky (mezi první a druhou přihrádku a mezi druhou a třetí přihrádku). Pro každý z daných prvků zakreslíme do dané přihrádky tolik koleček, kolikrát se v dané kombinaci tento prvek nachází, pokud se v dané kombinaci tento prvek nenachází, zůstane daná přihrádka prázdná. Tato přiřazení si znázorníme:

$a, a, a, a \rightarrow \circ\circ\circ\circ \mid\mid$	$a, a, a, b \rightarrow \circ\circ\circ \mid \circ \mid$	$a, a, a, c \rightarrow \circ\circ\circ \mid\mid \circ$
$a, a, b, b \rightarrow \circ\circ \mid \circ\circ \mid$	$a, a, b, c \rightarrow \circ\circ \mid \circ \mid \circ$	$a, a, c, c \rightarrow \circ\circ \mid\mid \circ\circ$
$a, b, b, b \rightarrow \circ \mid \circ\circ\circ \mid$	$a, b, b, c \rightarrow \circ \mid \circ\circ \mid \circ$	$a, b, c, c \rightarrow \circ \mid \circ \mid \circ\circ$
$a, c, c, c \rightarrow \circ \mid\mid \circ\circ\circ$	$b, b, b, b \rightarrow \mid \circ\circ\circ\circ \mid$	$b, b, b, c \rightarrow \mid \circ\circ\circ \mid \circ$
$b, b, c, c \rightarrow \mid \circ\circ \mid \circ\circ$	$b, c, c, c \rightarrow \mid \circ \mid \circ\circ\circ$	$c, c, c, c \rightarrow \mid\mid \circ\circ\circ\circ$

Ze znázornění můžeme vypozorovat, že každé čtyřčlenné kombinaci s opakováním ze 3 prvků a, b, c odpovídá jediná uspořádaná šestice o čtyřech kolečkách a dvou čárkách a také to platí obráceně, že uspořádaná šestici o čtyřech kolečkách a dvou čárkách odpovídá čtyřčlenné kombinaci s opakováním ze 3 prvků a, b, c. Našli jsme vzájemně jednoznačné přiřazení. Z toho plyne, že počet $C'_k(n) = C'_4(3)$ těchto kombinací s opakováním je roven počtu permutací s opakováním ze 2 prvků (kolečko a čárka) z nichž se jeden (kolečko) opakuje čtyřikrát a druhý (čárka) se opakuje dvakrát – platí: $C'_4(3) = P'(4,2)$.

Budeme-li se obecně zabývat k-člennými kombinacemi s opakováním z n prvků, přiřadíme stejným způsobem jako výše každé kombinaci uspořádanou skupinu s k kolečky a $(n-1)$ čárkami – bude se jednat o permutaci s opakováním ze 2 prvků, z nichž se jeden opakuje k-krát a druhý $(n-1)$-krát. Jedná se o vzájemně jednoznačné přiřazení, a tak platí:

$$P'(k; n-1) = \frac{[k+(n-1)]!}{k! \cdot (n-1)!} = \frac{(\mathrm{k}+n-1)!}{k! \cdot [(k+n-1)-k]!} = \binom{k+n-1}{k} =$$
$$= C_k(k+n-1) = C'_k(n).$$

Definice:

k-členná kombinace s opakováním z n prvků je neuspořádaná k-tice sestavená z těchto prvků tak, že každý je v ní nejvýše k-krát.

To znamená, že u kombinací s opakováním nezáleží na pořadí a prvky se opakují.

Označení a výpočet:

$C'_k(n)$ je počet k-členných kombinací s opakováním z n prvků

$$C'_k(n) = P'(k; n-1) = \frac{(k+n-1)!}{k! \cdot (n-1)!} = \binom{k+n-1}{k}. \qquad (1.6)$$

Odpověď na otázku z úvodu, kolika způsoby je možné rozdělit 20 stejných formulí mezi 10 týmů, zní: $C'_{20}(10) = \binom{20+10-1}{20} = \binom{29}{20} = 10\,015\,005$ způsoby.

Poznámka: Číslo $C'_k(n) = \binom{n+k-1}{k}$ kromě počtu k-členných kombinací s opakováním z n prvků udává ještě počet způsobů, kterými lze rozmístit k totožných předmětů do n přihrádek. Stejně jako výše to lze znázornit schematicky pomocí koleček a čárek, kde k koleček reprezentuje k totožných předmětů a $(n-1)$ čárek (přepážky mezi přihrádkami) reprezentuje n přihrádek.

Úloha 1.8: Určete, kolika způsoby lze rozdělit 12 stejných oříšků mezi 3 veverky.

Řešení:

- Pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním:

$$C'_k(n) = C'_{12}(3) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{12+3-1}{12} = \binom{14}{12} = \frac{14!}{12! \cdot 2!} = 91.$$

- Pomocí vztahu (1.5) pro permutace s opakováním – máme dva prvky (kolečko a čárka), z toho kolečko reprezentující oříšek se opakuje dvanáctkrát ($k = 12$) a čárka oddělující hromádky oříšků pro jednotlivé veverky se opakuje dvakrát ($n - 1 = 3 - 1 = 2$):

$$P'(k; n-1) = P'(12; 3-1) = \frac{[k + (n-1)]!}{k! \cdot (n-1)!} = \frac{[12+2]!}{12! \cdot 2!} = 91.$$

2. Přípravné úlohy

V této kapitole budeme řešit sadu úloh. Úlohy jsou sestavené tak, abychom si jednak procvičili vztahy a úvahy z předchozí kapitoly, ale také abychom si promysleli úlohy, které jsou analogické případům kvantových systémů s malým počtem částic ve statistické fyzice. Pokud to bude možné budeme úlohy řešit více způsoby: úvahou, vztahem, případně výčtem. Děláme to proto, abychom viděli, že všechny možnosti dávají stejné výsledky, a aby si každý čtenář mohl vybral metodu, která mu bude nejvíce vyhovovat.

Zadání: Máme nakoupené rostlinky, které budeme sázet do různých truhlíků či květináčů. Koupili jsme si pět rostlinek petúnií, každá rostlinka se liší barvou (zakoupili jsme žlutou, oranžovou, karmínovou, fialovou a modrou rostlinku petúnie) a čtyři rostlinky muškátů, každá rostlinka se liší barvou a zároveň nemá žádná stejný odstín jako některá z petúnií (zakoupili jsme bílou, růžovou, červenou a vínovou rostlinku muškátu). Pokud nebude jinak řečeno, tak v truhlících nám bude záležet na pořadí rostlinek, ale v květináčích nám na pořadí záležet nebude.

Úloha 2.1: Kolik máme různých barevných možností, jak obsadit těmito rostlinkami dvoumístný truhlík?

Řešení: Tuto úlohu nejprve vyřešíme úvahou, a poté až pomocí vztahu. Představíme si dvě místa v truhlíku a řekneme si, že na první místo vybíráme z 9 rostlinek a na druhé místo vybíráme jen z 8 rostlinek, protože zde nesmí být rostlinka, která již je na prvním místě. S využitím kombinatorického pravidla součinu dostáváme:

$$9 \cdot 8 = 72.$$

Teď tuto úlohu vyřešíme pomocí vhodného vztahu. Celkem máme 9 různobarevných rostlinek a dvoumístný truhlík. Chceme do truhlíku zasadit rostlinky a zajímají nás barevné možnosti, ve kterých rozlišujeme možnost se žlutou a oranžovou petúnii a možnost s oranžovou a žlutou petúnii – záleží na pořadí rostlinek, jde tedy o uspořádané dvojice – variace. Počet všech dvoučlenných variací z 9 prvků je dle vztahu (1.1):

$$V_k(n) = V_2(9) = \frac{9!}{(9-2)!} = \frac{7! \cdot 8 \cdot 9}{7!} = 72.$$

Vzhledem k malému počtu rostlinek můžeme také vytvořit tabulku (viz tabulka 2.1). První místo v květináči si „zafixujeme“ pro rostlinku jedné barvy a na druhé místo přiřazujeme rostlinky ostatních barev (kromě té, kterou máme na prvním místě), poté se barva na prvním místě vymění a na druhém místě zase střídáme barvy.

Tabulka 2.1: Všechny možnosti, jak osázet dvoumístný truhlík. V tabulce budeme pro barvy používat jen jejich počáteční písmena. Z tabulky je vidět, že ke každé jednotlivé barvě rostlinky lze přiřadit dalších 8 jiných barev, tj. $8+8+8+8+8+8+8+8+8=9\cdot 8=72$.

rostlinka na prvním místě	možné rostlinky na druhém místě
Ž	O, K, F, M, B, R, Č, V
O	Ž, K, F, M, B, R, Č, V
K	O, Ž, F, M, B, R, Č, V
F	O, K, Ž, M, B, R, Č, V
M	O, K, F, Ž, B, R, Č, V
B	O, K, F, M, Ž, R, Č, V
R	O, K, F, M, B, Ž, Č, V
Č	O, K, F, M, B, R, Ž, V
V	O, K, F, M, B, R, Č, Ž

Úloha 2.2: Kolik máme možností, pokud budeme mít pětimístný truhlík?

Řešení: Tato úloha je stejného typu jako úloha 2.1, akorát místo dvoumístného truhlíku máme pětimístný truhlík. Nejprve tuto úlohu vyřešíme úvahou, a poté pomocí vhodného vztahu. Představíme si pět míst v truhlíku a řekneme si, že na první místo vybíráme z 9 rostlinek, na druhé místo z 8 rostlinek, protože zde nesmí být barva rostlinky, která je na prvním místě, na třetí místo vybíráme ze 7 rostlinek, na čtvrté místo vybíráme z 6 rostlinek a na páté místo vybíráme jen z 5 rostlinek. Dostáváme:

$$9\cdot 8\cdot 7\cdot 6\cdot 5=15\,120.$$

Řešení úlohy pomocí vhodného vztahu je stejné jako v předchozí úloze. Máme 9 různobarevných rostlinek, ale tentokrát máme pětimístný truhlík, takže chceme určit počet všech pětičlenných variací z 9 prvků. Pomocí vztahu (1.1) pro variace dostáváme:

$$V_k(n)=V_5(9)=\frac{9!}{(9-5)!}=\frac{4!\ \cdot 5\cdot 6\cdot 7\cdot 8\cdot 9}{4!}=15\,120.$$

Poznámka: V první a druhé úloze (viz úloha 2.1 a úloha 2.2) jsou jednotlivé rostlinky různobarevné a jsou tím pádem pro nás rozlišitelné.

Úloha 2.3: Kolik máme možností, jak do třímístného truhlíku zasadit rostlinky, pokud nám záleží jen na jejich druhu (tj. neuvažujeme barvu rostlinky, lze si představit, že rostlinky ještě nerozkvetly, takže barvu jejich květů ještě neznáme)?

Řešení: V této úloze nás oproti úloze 2.1 a 2.2 nezajímá barva rostlinek, ale zajímá nás jen druh rostlinky. V našem případě máme dva druhy – petúnie a muškáty. Víme, že od petúnií máme 5 rostlinek a od muškátů máme 4 rostlinky, je jich tedy dostatek, i k osazení truhlíku rostlinkami jednoho druhu. Naším úkolem je určit možné trojice, které vzniknou, pokud nás zajímá jen druh rostlinky.

Tuto úlohu opět nejprve vyřešíme úvahou. Představíme si tři místa v truhlíku a řekneme si, že na první místo vybíráme ze 2 druhů rostlinek, na druhé místo také vybíráme ze 2 druhů rostlinek, protože se druhy rostlinek mohou opakovat a na třetí místo také vybíráme ze 2 druhů rostlinek. Dostáváme:

$$2 \cdot 2 \cdot 2 = 8.$$

Při řešení úlohy pomocí vztahu si uvědomíme, že se prvky mohou opakovat a záleží nám na jejich pořadí, tj. jde nám o to, jak určit počet všech tříčlenných variací s opakováním ze 2 prvků. Našimi 2 prvky jsou petúnie a muškáty. Od každého druhu máme dost rostlinek, aby mohl každý druh zaplnit celý truhlík. Pomocí vztahu (1.4) pro variace s opakováním dostáváme:

$$V_k'(n) = V_3'(2) = 2^3 = 8.$$

Tuto úlohu lze ještě řešit tak, že si různé trojice rostlin vypíšeme, neboť máme jen 2 druhy rostlinek, tj. možnosti rostlinek v třímístném truhlíku jsou:

petúnie-petúnie-petúnie	muškát-muškát-muškát
petúnie-petúnie-muškát	muškát-muškát-petúnie
petúnie-muškát-petúnie	muškát-petúnie-muškát
muškát-petúnie-petúnie	petúnie-muškát-muškát

Z toho dostáváme, že máme celkem 8 možností, jak zasadit trojice rostlinek, pokud nám záleží jenom na druhu rostlinky.

Úloha 2.4: Kolik máme možností v případě pětimístného truhlíku, pokud nás nebude zajímat barva, ale jen druh rostlinky?

Řešení: Tato úloha je stejného typu jako úloha 2.3, pořád máme 2 druhy rostlinek, ale tentokrát máme pětimístný truhlík. Nejprve úlohu vyřešíme úvahou. Představíme si pětimístný truhlík a budeme se ptát, z kolika druhů vybíráme na první, druhé, třetí, čtvrté a páté místo a zároveň, abychom měli výpočet jednodušší, budeme chvíli předpokládat, že i od muškátů máme 5 rostlinek, takže dostaneme:

$$2 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 2 = 32,$$

ale víme, že od muškátu doopravdy 5 rostlinek nemáme, a proto je potřeba tuto jednu možnost s 5 muškáty od našeho výsledku odečíst, a pak dostáváme:

$$32 - 1 = 31.$$

Při řešení úlohy pomocí vztahu chceme určit počet všech pětičlenných variací s opakováním ze 2 prvků, ale musíme si dát pozor na to, že od muškátů máme jen 4 kusy. Pro jednoduchost výpočtu ale opět předpokládáme, že i od muškátů máme 5 kusů, a jejich skutečný počet zohledníme na konci výpočtu. Pomocí vztahu (1.4) spočítáme pětičlennou variaci s opakováním ze dvou prvků a dostáváme:

$$V'_k(n) = V'_5(2) = 2^5 = 32.$$

Ještě je potřeba odečíst variaci s pěti muškáty, která nemůže nastat. Dostáváme tedy:

$$V'_5(2) - 1 = 32 - 1 = 31.$$

Úloha 2.5: Kamarádka si od nás chce vzít 3 rostlinky do své zahrádky. Kolik existuje možností, jakou trojici si může vybrat?

Řešení: Tuto úlohu nejprve vyřešíme úvahou. Naše kamarádka si chce vzít 3 rostlinky z celkového počtu 9 rostlinek. Dalo by se říct, že máme $9 \cdot 8 \cdot 7 = 504$ možností, jak si rostlinky může vybrat, ale v tomto případě nezáleží na pořadí výběru rostlinek. Je jedno, jestli si nejprve vybere modrou petúnii a poté růžový muškát nebo naopak, z čehož plyne, že je potřeba počet možností vydělit počtem možných uspořádání – trojici lze uspořádat 3! způsoby. Pak dostáváme:

$$\frac{9 \cdot 8 \cdot 7}{3!} = \frac{504}{6} = 84.$$

Teď vyřešíme tuto úlohu pomocí vztahu z předchozí kapitoly. Chceme vybrat 3 rostlinky z 9 a nejsme omezeni žádnými podmínkami ohledně druhu nebo barvy. Jednotlivé rostlinky jsou rozlišitelné, neopakují se a nezáleží nám na pořadí jejich výběru. Chceme tedy určit počet všech tříčlenných kombinací z 9 prvků (viz vztah (1.3)). Dostáváme:

$$C_k(n) = C_3(9) = \binom{9}{3} = \frac{9!}{3!\,(9-3)!} = \frac{9!}{3! \cdot 6!} = \frac{6! \cdot 7 \cdot 8 \cdot 9}{2 \cdot 3 \cdot 6!} = 84.$$

Úloha 2.6: Kamarádka si od nás chce vzít ještě nerozkvetlé rostlinky: a) kolik má možností, pokud chce 3 rostlinky a b) kolik má možností, pokud chce 5 rostlinek?

Řešení: Jelikož jsou rostlinky nerozkvetlé, bude nám v této úloze záležet jen na druhu rostlinky, ale barvy jsou pro nás nepodstatné. Rostlinky jednoho druhu se mohou opakovat. Stejně jako v úloze 2.5 nám nebude záležet na uspořádání rostlinek.

a) V této úloze půjde o tříčlenné kombinace s opakováním ze 2 prvků (petúnií máme 5 kusů a muškátu máme 4 kusy, tedy dostatek). Pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním dostáváme:

$$C'_k(n) = C'_3(2) = \binom{3+2-1}{3} = \binom{4}{3} = \frac{4!}{3! \cdot (4-3)!} = 4.$$

Nebo lze tuto úlohu vyřešit tak, že si všechny kombinace rozepíšeme. Jelikož se jedná o kombinace (přesněji kombinace s opakováním), jedná se tedy o neuspořádané trojice (je jedno, jestli to bude AAB nebo ABA nebo BAA – tyto všechny 3 možnosti jsou jedna kombinace):

petúnie-petúnie-petúnie	petúnie-muškát-muškát
petúnie-petúnie-muškát	muškát-muškát-muškát

Z tohoto rozepsání vidíme, že opravdu máme 4 možnosti.

Tuto úlohu lze také vyřešit pomocí „koleček a přihrádek“, resp. přepážek. Máme 2 typy prvků, těmi jsou petúnie a muškát, a chceme utvořit trojici. Představíme si tedy, že máme dvě přihrádky (první pro petúnie a druhou pro muškáty). Pro vytvoření dvou přihrádek potřebujeme jednu přepážku (oddělovač), kterou bude reprezentovat svislá čárka. Do těchto dvou přihrádek musíme umístit 3 kolečka, která reprezentují rostlinky. A teď se ptáme, kolika způsoby můžeme rozmístit 1 přepážku a 3 prvky, a to jde právě 4 způsoby.

Grafické znázornění možností:

∘∘∘ |	∘ | ∘∘
∘∘ | ∘	| ∘∘∘

První znázornění znamená, že máme tři petúnie a žádný muškát.

Anebo k výsledku dojdeme za použití vztahu (1.5) pro permutace s opakováním, kdy dvěma prvky jsou tři rostlinky a jedna přepážka, která oddělí oba typy rostlinek od sebe. Po dosazení do vztahu (1.5) pro permutace s opakováním dostáváme:

$$P'(3,1) = \frac{(3+1)!}{3! \cdot 1!} = \frac{4!}{3!} = 4.$$

Anebo můžeme hledat počet čtveřic složených ze 3 koleček a 1 přepážky, tj. vybíráme jedno místo ze 4, kam umístíme přepážku. Dostáváme:

$$C_1(4) = \binom{4}{1} = 4.$$

b) V tomto případě chceme vytvořit pětičlennou kombinaci s opakováním ze 2 prvků. I když si musíme dát pozor, že od muškátu máme jen 4 kusy, pro zjednodušení výpočtu budeme nejprve předpokládat, že i od muškátu máme 5 kusů, a poté tu jednu kombinaci s 5 muškáty odečteme:

$$C'_k(n) = C'_5(2) = \binom{5+2-1}{5} = \binom{6}{5} = \frac{6!}{5! \cdot (6-5)!} = 6,$$

po odečtení jedné kombinace s 5 muškáty dostáváme:

$$C'_5(2) - 1 = 6 - 1 = 5.$$

K tomuto výsledku lze dojít i v případě, že si ty kombinace vypíšeme, vypsáním dostaneme:

petúnie-petúnie-petúnie-petúnie-petúnie

petúnie-petúnie-petúnie-petúnie-muškát

petúnie-petúnie-petúnie-muškát-muškát

petúnie-petúnie-muškát-muškát-muškát

petúnie-muškát-muškát-muškát-muškát

Z tohoto výčtu zjistíme, že máme 5 možností.

Tuto úlohu můžeme také vyřešit pomocí „koleček a přepážek". Máme dva typy prvků petúnie a muškát a chceme utvořit pětici. Pro jednodušší výpočet budeme nejprve předpokládat, že i od muškátů máme dostatek kusů, a to, že tomu tak doopravdy není, zohledníme jako v předchozích případech na konci výpočtu. Máme tedy 5 koleček rozdělit do 2 přihrádek a k tomu je potřeba 1 přepážka. Bude se jednat o permutace s opakováním a dostáváme:

$$P'(5,1) = \frac{(5+1)!}{5! \cdot 1!} = \frac{6!}{5!} = 6,$$

ale jelikož od muškátů nemáme pět kusů musíme možnost s pěti muškáty odečíst, dostáváme tedy $6 - 1 = 5$ možností.

Poznámka: Pokud nám jde jen o druhy rostlinek a nezáleží nám na pořadí, tak je vhodné takovéto úlohy vyřešit pomocí „koleček a přihrádek". Tedy chceme rozdělit k koleček (počet koleček je určen počtem nerozkvetlých rostlinek, které chceme vybrat) do n přihrádek (počet přihrádek je určen počtem druhů rostlinek). Dostaneme tedy:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k}.$$

Anebo si ještě uvědomíme, že pokud máme n přihrádek (druhy rostlinek) potřebujeme $(n-1)$ přepážek. Dá se na to tedy nahlížet, že máme dva prvky, a to kolečko a přepážku. Prvek kolečko se opakuje k-krát a prvek přepážka se opakuje $(n-1)$-krát. Pomocí vztahu (1.5) pro permutace s opakováním dostáváme:

$$P'(k, n-1) = \frac{[k + (n-1)]!}{k! \cdot (n-1)!}.$$

Společné zadání pro úlohy 2.7 až 2.9: Výše uvedených 9 rostlinek chceme zasadit do květináčů. Můžeme je zasadit do 4 květináčů v kuchyni, anebo do 3 květináčů v obýváku. Do jednoho květináče lze dát více rostlinek (i všech 9 do jednoho květináče), některé květináče mohou zůstat úplně prázdné.

Úloha 2.7: Kolik máme možností, jak rostlinky zasadit?

Řešení: V tomto případě máme 9 rozlišitelných rostlinek zasadit do 7 květináčů. Zajímá nás, která rostlinka je v kterém květináči, ale nezáleží na uspořádání v jednotlivých květináčích. Lze se na to dívat jako na úkol umístit n rozlišitelných předmětů do r přihrádek a připouštíme i prázdné přihrádky, jsou to tedy variace s opakováním. Pro každý předmět máme na výběr z r přihrádek, kam ho umístit, tj. pro první rostlinku máme 7 možností, kam ji zasadit, protože máme 7 květináčů, pro druhou rostlinku také máme 7 možností, kam ji zasadit, a to samé platí i pro třetí až devátou rostlinku. Protože pro každou z 9 rostlinek máme 7 možností, kam ji zasadit, celkem tedy máme $r^n = 7^9 = 40\ 353\ 607$ možností.

Úloha 2.8: Kolik máme možností, jak zasadit rostlinky, pokud nás bude zajímat, jen kolik je rostlinek v jednotlivých květináčích, ale ne to, které rostlinky to konkrétně jsou?

Řešení: V této úloze je pro nás těch 9 rostlinek nerozlišitelných, protože nás nezajímá, kde která rostlinka je. Hledáme počet všech schémat sestavených z k koleček (nerozlišitelných předmětů) a $n - 1$ oddělovačů (n přihrádek) – to lze určit buď podle vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním anebo podle vztahu (1.5) pro permutace s opakováním.

Nejprve to spočteme pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním, kde $k = 9$, protože máme 9 rostlinek a $n = 7$, protože máme 7 květináčů. Dostáváme:

$$C'_k(n) = C'_9(7) = \binom{9+7-1}{9} = \binom{15}{9} = \frac{15!}{9! \cdot 6!} = 5\ 005.$$

Při řešení pomocí permutací s opakováním platí, že jde o permutaci dvou prvků, z nichž jeden (rostlinka) se opakuje 9krát a druhý (oddělovač jednotlivých květináčů) se opakuje 6krát. Dostáváme:

$$P'(k, n-1) = P'(9,6) = \frac{(9+6)!}{9! \cdot 6!} = \frac{15!}{9! \cdot 6!} = 5\,005.$$

Úloha 2.9: Kolik máme možností zasazení rostlinek, pokud nám bude záležet jen na tom, kolik rostlinek je v kuchyni a kolik v obývýáku?

Řešení: V této úloze nás vlastně nezajímají samotné květináče, ale máme jen dvě místa, a to kuchyň a obývák. Počet nerozlišitelných předmětů k je 9 (máme 9 rostlinek) a počet přihrádek n je 2. Počet možností tedy vypočteme pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním:

$$C'_k(n) = C'_2(9) = \binom{9+2-1}{9} = \binom{10}{9} = \frac{10!}{9! \cdot (10-9)!} = 10.$$

Anebo tuto úlohu vyřešíme za pomoci tabulky (viz tabulka 2.2), kam jednotlivé počty rostlinek v kuchyni a obývýáku vypíšeme.

Tabulka 2.2: Počet rostlinek v kuchyni a obývýáku. V tabulce je situace ještě znázorněna pomocí koleček a čárek. Kolečka nám reprezentují jednotlivé rostlinky, tj. je jich 9 a čárky nám oddělují místnosti, tj. máme 1 čárku, která odděluje kuchyň od obývýáku.

kuchyň	obývák	schéma
9	0	∘∘∘∘∘∘∘∘∘ |
8	1	∘∘∘∘∘∘∘∘ | ∘
7	2	∘∘∘∘∘∘∘ | ∘∘
6	3	∘∘∘∘∘∘ | ∘∘∘
5	4	∘∘∘∘∘ | ∘∘∘∘
4	5	∘∘∘∘ | ∘∘∘∘∘
3	6	∘∘∘ | ∘∘∘∘∘∘
2	7	∘∘ | ∘∘∘∘∘∘∘
1	8	∘ | ∘∘∘∘∘∘∘∘
0	9	| ∘∘∘∘∘∘∘∘∘

Z tabulky 2.2 je vidět, že i tímto způsobem řešení dostaneme, že máme 10 možností.

Poznámka: Tabulkou lze úlohu řešit jen pro velmi malé počty přihrádek.

Společné zadání pro úlohy 2.10 až 2.12: Teď budeme chtít našich 9 rostlinek zasadit do malých květináčků, v květináčku ale tentokrát může být maximálně jedna rostlinka. Máme na to připravených 7 květináčků v chodbě a 5 květináčků v ložnici.

Úloha 2.10: Kolik máme možností, jak zasadit rostlinky, pokud nám nezáleží na umístění konkrétních rostlinek? Tj. zajímáme se jen o to, které květináčky jsou plné a které prázdné.

Řešení: Celkem teď máme 12 květináčků a v každém může být maximálně 1 rostlinka. Z těch 12 míst chceme vybrat 9 míst, kam těch našich 9 v této úloze nerozlišitelných rostlinek zasadíme. A to určíme pomocí vztahu (1.3) pro kombinace a dostáváme:

$$C_k(n) = C_9(12) = \binom{12}{9} = 220.$$

Úloha 2.11: Kolik máme možností, jak rostlinky zasadit, pokud v každém květináčku může být maximálně jedna rostlinka?

Řešení: Oproti předchozí úloze musíme započítat různá rozmístění rostlinek v květináčcích, protože v této úloze jsou rostlinky rozlišitelné. Máme tedy 12 květináčků a v každém může být maximálně 1 rostlinka. Vybíráme tedy 9 míst z 12, kam těch 9 rostlinek zasadíme a tento výsledek je ještě potřeba vynásobit 9!, abychom započetli ta různá rozmístění rostlinek v květináčcích. Dostáváme:

$$9! \cdot \binom{12}{9} = 9! \cdot 220 = 79\,833\,600.$$

Tuto úlohu lze řešit ještě jedním postupem. Srovnáme si všechny květináčky do řady, počet možností (jde o permutaci) je 12! a ten vydělíme možnými pořadími posledních tří, protože ty neosazujeme, což je 3!. Dostáváme tedy:

$$\frac{12!}{3!} = 79\,833\,600.$$

Úloha 2.12: Kolik máme možností zasazení rostlinek, pokud je v každém květináčku maximálně jedna rostlinka, ale teď je pro nás podstatné jen to, kolik rostlinek je v chodbě a kolik v ložnici?

Řešení: V tomto případě nás zajímá, kolik rostlinek lze zasadit v chodbě a kolik v ložnici, víme, že v ložnici máme 5 květináčků, tj. může zde být zasazených maximálně 5 rostlinek a v chodbě máme 7 květináčků, tj. může zde být zasazených maximálně 7 rostlinek, nejlépe to lze vyjádřit tabulkou. Z tabulky 2.3 je vidět, že máme 4 možnosti, jak rostlinky zasadit.

Tabulka 2.3: Počet rostlinek v ložnici a v chodbě.

ložnice	chodba
5	4
4	5
3	6
2	7

Pokud bychom k tomuto výsledku chtěli dojít pomocí kombinatorického vztahu, tak bychom použili vztah (1.6) pro kombinace s opakováním. Předpokládali bychom, že počty květináčků v ložnici a v chodbě nejsou omezené a až na konci výpočtu bychom zohlednili, že v ložnici je 5 květináčků a v chodbě je 7 květináčků. V této úloze nás zajímají, jen kolik rostlinek je v chodbě a kolik v ložnici, tj. máme jen 2 místa, kam můžeme zasadit 9 rostlinek. V řeči „koleček a přihrádek" máme rozdělit 9 koleček do 2 přihrádek. Dostáváme:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{9+2-1}{9} = \binom{10}{9} = 10.$$

Tento výsledek nám říká, jak lze zasadit 9 rostlinek do 2 místností, pokud nejsme omezeni počty květináčků v daných místnostech. Ale v této úloze jsme omezeni počty květináčků v místnostech, v ložnici máme 5 květináčků a v chodbě máme 7 květináčků. Nemůžou tedy nastat možnosti, kdy máme 6, 7, 8 anebo 9 rostlinek v ložnici a také nemůžou nastat možnosti, kdy máme 8 anebo 9 rostlinek v chodbě. Celkem tedy nemůže nastat 6 možností, které musíme odečíst od předchozího výsledku. Dostáváme tedy:

$$10 - 6 = 4.$$

Máme tedy 4 možnosti, jak rostlinky zasadit.

Poznámka: V naší úloze je omezení na počty v jednotlivých místnostech tak velké, že podstatně jednodušší je úlohu řešit výčtem možností než pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním, a pak odečítat nepřípustné možnosti.

3. Příklady užití kombinatoriky ve fyzikálních úlohách a vztazích

V této kapitole budeme řešit několik fyzikálních úloh z různých oblastí fyziky, ve kterých použijeme kombinatorické vztahy. Základní teorii připomeneme buď na začátku řešení úlohy anebo ještě před zadáním úlohy.

Výpočet potenciální energie soustavy bodových nábojů

V tomto odstavci si spočteme úlohu, která se týká potenciální energie soustavy hmotných bodů, bude se tedy jednat o úlohu z elektřiny a magnetismu.

Úloha 3.1: Kolik různých členů má výraz pro potenciální energii 4 bodových nábojů?

Řešení: Potenciální energii soustavy 2 bodových nábojů můžeme spočítat tak, že si představíme práci, kterou vykonáme na vytvoření této soustavy. Umístění prvního náboje nevyžaduje žádnou práci, protože na náboj nepůsobí žádná síla. Při umisťování druhého náboje již budeme nějakou práci konat. Vykonaná práce se bude rovnat potenciální energii, kterou daný náboj získá, tj. součinu jeho náboje Q_2 a elektrického potenciálu, který v daném místě vytváří první, již umístěný, náboj a který je roven $\varphi = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q_1}{r_{12}}$, kde Q_1 je hodnota prvního náboje a r_{12} je vzdálenost obou nábojů, tj. $E_p = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q_1 Q_2}{r_{12}}$. Povšimněme si, že oba náboje zde vystupují symetricky, tj. je jedno, zda jsme začali s prvním nábojem nebo s druhým. Mohli bychom tedy spočítat potenciální energii každého náboje v poli toho druhého. A potom součet těchto energií dělit dvěma (protože tu dvojici jsme započetli dvakrát). To nás dovede k obecnému vztahu pro potenciální energii soustavy bodových nábojů:

$$E_p = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{Q_i Q_j}{r_{ij}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{dvojice\ i,j}\frac{Q_i Q_j}{r_{ij}}. \tag{3.1}$$

Každý člen nám udává vzájemnou potenciální energii 2 bodových nábojů. V první verzi vztahu (3.1) sčítáme přes všechny dvojice, proto je před sumou jedna polovina, která kompenzuje skutečnost, že v součtu máme oba členy $\frac{Q_A Q_B}{r_{AB}}$ a $\frac{Q_B Q_A}{r_{BA}}$, které jsou stejně velké a odpovídají jediné energii. V sumě v druhé verzi vztahu (3.1) vybíráme neuspořádané dvojice, takže každý energetický člen započteme pouze jednou. Počet členů odpovídá počtu neuspořádaných dvojic bodových nábojů, budeme tedy vytvářet kombinace.

V naší úloze máme 4 bodové náboje a chceme určit všechny možné dvojice. Použijeme tedy vztah (1.3) pro kombinace: $\binom{4}{2} = \frac{4!}{2!\cdot 2!} = \frac{3\cdot 4}{2} = 6$, tzn. že tvar potenciální energie bude mít 6 sčítanců, protože jich není mnoho, můžeme je i vypsat:

$$E_p = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{Q_1Q_2}{r_{12}} + \frac{Q_1Q_3}{r_{13}} + \frac{Q_1Q_4}{r_{14}} + \frac{Q_2Q_3}{r_{23}} + \frac{Q_2Q_4}{r_{24}} + \frac{Q_3Q_4}{r_{34}}\right).$$

Spektrální čáry

V této podkapitole budeme řešit úlohy týkající se spektrálních čar atomu vodíku a lineárního harmonického oscilátoru (LHO).

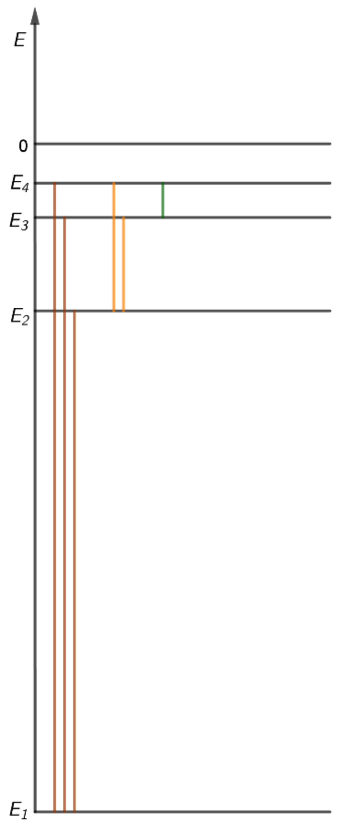
Úloha 3.2: Uvažujme první 4 energetické hladiny elektronu v atomu vodíku. Kolik spektrálních čar odpovídá přechodům mezi nimi?

Řešení: Naším úkolem je vybrat dvojici energetických hladin, která bude vyjadřovat, z které hladiny a na kterou hladinu elektron při vyzáření fotonu přešel. A ptáme se na to, kolik takovýchto dvojic existuje. To lze určit pomocí kombinací, protože nechceme započítávat uspořádané dvojice (A, B) a (B, A), ale jen jednu z nich, protože elektron přechází vždy z hladiny s vyšší energií na hladinu s nižší energií.

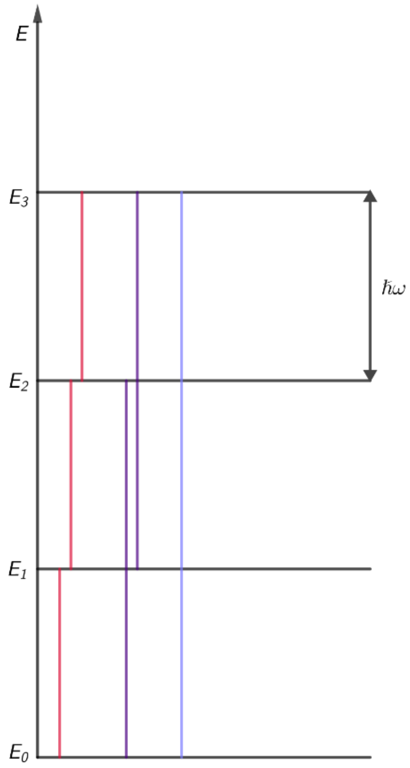
V naší úloze máme 4 energetické hladiny a chceme určit všechny neuspořádané dvojice. Pomocí vztahu (1.3) pro kombinace dostáváme:

$$C_k(n) = C_2(4) = \binom{4}{2} = \frac{4!}{2!\cdot 2!} = \frac{3\cdot 4}{2} = 6.$$

Čtyřem energetickým hladinám u vodíku odpovídá 6 spektrálních čar. Tyto spektrální čáry jsme znázornili na obrázku 3.1, kde jsou stejnou barvou znázorněny spektrální čáry ze stejné série. Hnědou barvou jsou znázorněny spektrální čáry z Lymanovy série, žlutou barvou jsou znázorněny spektrální čáry z Balmerovy série a zelenou barvou je znázorněna spektrální čára z Paschenovy série.



Obrázek 3.1: Přechody mezi energetickými hladinami pro vodík, každá čára odpovídá jedné spektrální čáře, délka čáry je úměrná frekvenci čáry.



Obrázek 3.2: Spektrální čáry pro LHO, všechny přechody zakreslené stejnou barvou odpovídají jediné spektrální čáře.

Úloha 3.3: Uvažujme první 4 energetické hladiny elektronu lineárního harmonického oscilátoru. Kolik spektrálních čar odpovídá přechodům mezi nimi?

Řešení: Zdánlivě se může zdát, že se jedná o zcela totožnou úlohu s úlohou 3.2. I zde je počet možných dvojic ze 4 hladin roven 6. Ale pozor tento výsledek neodpovídá počtu spektrálních čar. Energetické spektrum lineárního harmonického oscilátoru je ekvidistantní a pro energii fotonu, který přechází z hladiny s kvantovým číslem n na hladinu s kvantovým číslem m platí:

$$E_{fotonu} = E_n - E_m = \hbar\omega(n - m).$$

Fotony, které vzniknou při přechodu elektronu z hladin se stejným rozdílem kvantových čísel, budou mít stejnou energii a vytvoří tak jednu spektrální čáru. Například, pokud se jedná o sousední energie, tak jak v případě, že elektron přechází z druhé na první, tak v případě, že přechází ze třetí na druhou, či ze čtvrté na třetí, tak je energie fotonu rovna $\hbar\omega$ a ve spektru všechny tyto přechody odpovídají jediné spektrální čáře. V případě LHO tedy počet spektrálních čar neodpovídá počtu různých dvojic kvantových čísel, ale počtu jejich různých nenulových rozdílů. V našem případě největší rozdíl roven $4 - 1 = 3$ a nejmenší nenulový rozdíl je roven 1. Celkově máme tedy tři různé rozdíly, tedy při přechodech mezi prvními 4 hladinami LHO budou vznikat fotony jen 3 různých energií a ve spektru budeme pozorovat jen 3 spektrální čáry. Spektrální čáry si zobrazíme na obrázku 3.2, kde máme znázorněné všechny možné přechody elektronu, přechody odpovídající jedné spektrální čáře jsou znázorněny stejnou barvou, takže i když v obrázku je 6 čar, spektrální čáry jsou jen 3.

Degenerace energie

V této podkapitole budeme řešit úlohy týkající se stupně degenerace pro symetrický dvoudimenzionální a třídimenzionální harmonický oscilátor.

Úloha 3.4: Určete stupeň degenerace symetrického dvoudimenzionálního (2D) lineárního harmonického oscilátoru (LHO), pokud je jeho celková energie $3\hbar\omega$.

Řešení: Pro jednodimenzionální (1D) LHO platí, že pokud je ve stavu označeném kvantovým číslem n ($n \in \mathbb{N}_0$), pak je jeho energie rovna $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$. Pokud má dvoudimenzionální problém separovatelný hamiltonián, což u 2D LHO platí, pak na něj můžeme nahlížet jako na dva oddělené jednodimenzionální problémy. Celkovou energii získáme jako součet energií obou jednodimenzionálních stavů. Pokud stavy 1D LHO jsou popsány kvantovými čísly j a k, potom je jeho energie rovna $E_{j,k} = E_j + E_k = \hbar\omega\left(j + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega(j + k + 1)$. Vidíme tedy, že energie závisí na součtu kvantových čísel $j + k$. V zadaném případě je součet $j + k = 2$.

Stupeň degenerace, který máme určit, je roven počtu způsobů, kterými lze součet $j + k$ realizovat pomocí nezáporných celých čísel.

Tuto úlohu lze například vyřešit tak, že si jednotlivé součty vypíšeme do tabulky 3.1 a zjistíme, o jaký stupeň degenerace se jedná.

Tabulka 3.1: Jednotlivé hodnoty a součty kvantových čísel. V tabulce je v prvním sloupci součet kvantových čísel, v druhém sloupci jsou možné hodnoty kvantového čísla j, ve třetím sloupci jsou možné hodnoty kvantového čísla k tak, aby platilo, že součet $j + k = 2$. Ve čtvrtém a pátém sloupci jsou počty kvantových čísel znázorněny pomocí kuliček, abychom si dokázali lépe představit, jak se kuličky rozdělují do přihrádek, což si popíšeme dále. Z tabulky je vidět, že součet kvantových čísel $j + k = 2$, lze realizovat 3 způsoby, a proto je stupeň degenerace 3.

$j + k$	j	k	j	k
2	2	0	••	
2	1	1	•	•
2	0	2		••

Můžeme si povšimnout toho, že pokud je součet kvantových čísel $j + k = z$, tak je počet způsobů, kterými lze tento součet realizovat, roven $z + 1$, protože kvantové číslo j může nabývat hodnot od nuly po z. V našem případě je $z = 2$, a tedy počet způsobů, kterými lze součet realizovat, je roven 3. Stupeň degenerace uvedené energie je tedy roven 3.

Pro nalezení obecnějšího postupu se můžeme na tuto úlohu dívat tak, že máme z „kuliček“ rozdělit do n „přihrádek“, k čemuž potřebujeme $(n - 1)$ přepážek. Toto je názorně znázorněno v tabulce 3.1, kde v posledních dvou sloupcích rozdělujeme 2 kuličky do přihrádek označených jako j a k. V případě LHO máme počet kuliček daný součtem kvantových čísel $(j + k)$ a počet přihrádek je dán dimenzí oscilátoru n (tj. počtem kvantových čísel, které sčítáme). V tomto případě $n = 2$. K určení výsledku použijeme vztah (1.6) pro kombinace s opakováním a dostáváme:

$$C'_z(n) = \binom{z + n - 1}{z} = \binom{2 + 2 - 1}{2} = \binom{3}{2} = 3.$$

Úloha 3.5: Určete stupeň degenerace symetrického 2D LHO, pokud je jeho celková energie rovna $10\hbar\omega$.

Řešení: Jedná se o úlohu zcela analogickou k úloze 3.4. Pokud je celková energie 2D LHO rovna $10\hbar\omega$, pak je součet kvantových čísel $j + k = 9$. I v tomto případě bychom mohli tuto úlohu řešit výčtem, ale byl by zbytečně zdlouhavý. Z předchozí úlohy víme, že součet kvantových čísel $j + k = 9$ lze realizovat $j + k + 1$ způsoby, v této úloze tedy 10 způsoby, stupeň degenerace je 10.

Pokud budeme tuto úlohu řešit pomocí kombinací s opakováním, máme $z = 9$ „kuliček" a $n = 2$ přihrádek. Dostáváme:

$$C'_z(n) = \binom{z+n-1}{z} = \binom{9+2-1}{9} = \binom{10}{9} = 10.$$

Úloha 3.6: Určete stupeň degenerace symetrického třídimenzionálního (3D) lineárního harmonického oscilátoru (LHO), pokud je jeho celková energie rovna $\frac{9}{2}\hbar\omega$.

Řešení: Jak bylo vysvětleno v úloze 3.4, tak LHO je separovatelný problém, takže na něj lze v jednotlivých souřadnicích nahlížet jako na jednodimenzionální problémy a celková energie 3D LHO je dána součtem energií 1D LHO, tj. $E_{j,k,l} = E_j + E_k + E_l = \hbar\omega\left(j + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(l + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(j + k + l + \frac{3}{2}\right)$, kde j, k a l jsou nezáporná celá kvantová čísla příslušející stavům 1D LHO v každé souřadnici. Celková energie tedy závisí na součtu kvantových čísel $j + k + l$. Součet kvantových čísel v této úloze je $j + k + l = 3$.

Tato úloha se stejně jako předchozí dvě úlohy o 2D LHO ptá, kolika způsoby lze součet $j + k + l$ realizovat pomocí nezáporných celých čísel. Jedno z možných způsobů řešení je, že si jednotlivé možnosti vypíšeme do tabulky. Z tabulky 3.2 vyplývá, že tento součet lze realizovat 10 způsoby, a proto je stupeň degenerace 10. Tento způsob řešení je ale vhodný jen pro malé součty kvantových čísel $j + k + l$.

Tabulka 3.2: Jednotlivé hodnoty a součty kvantových čísel. V tabulce je v prvním sloupci součet kvantových čísel, v druhém sloupci jsou možné hodnoty kvantového čísla j, ve třetím sloupci jsou možné hodnoty kvantového čísla k, ve čtvrtém sloupci jsou možné hodnoty kvantového čísla l tak, aby platilo, že součet kvantových čísel $j + k + l = 3$. V pátém, šestém a sedmém sloupci jsou hodnoty kvantových čísel znázorněny pomocí kuliček, abychom si dokázali lépe představit, jak se kuličky rozdělují do přihrádek, což si popíšeme dále.

$j+k+l$	j	k	l	j	k	l
3	3	0	0	•••		
3	2	1	0	••	•	
3	2	0	1	••		•
3	1	2	0	•	••	
3	1	1	1	•	•	•
3	1	0	2	•		••
3	0	3	0		•••	
3	0	2	1		••	•
3	0	1	2		•	••
3	0	0	3			•••

I tuto úlohu můžeme řešit pomocí rozdělování „kuliček“ do „přihrádek“, rozdělení kuliček do přihrádek jsme si znázornili v tabulce 3.2 v posledních třech sloupcích. I v případě 3D LHO máme počet kuliček daný součtem $z = j + k + l = 3$ a počet přihrádek je dán dimenzí oscilátoru (tj. počtem kvantových čísel, které sčítáme), v tomto případě jsou to $n = 3$. Máme 3 kuličky rozdělit mezi 3 přihrádky. K určení počtu možností použijeme vztah (1.6) pro kombinace s opakováním. Dostáváme:

$$C'_z(n) = \binom{z+n-1}{z} = \binom{3+3-1}{3} = \binom{5}{3} = \frac{5!}{3!\cdot 2!} = \frac{4\cdot 5}{2} = 10.$$

Součet lze tedy realizovat 10 způsoby, a proto je stupeň degenerace zadané energie roven 10.

Úloha 3.7: Určete stupeň degenerace symetrického 3D lineárního harmonického oscilátoru (LHO), pokud je jeho celková energie rovna $\frac{21}{2}\hbar\omega$.

Řešení: V této úloze je součet kvantových čísel $j + k + l = 9$. Úloha by šla opět řešit tak, že bychom si jednotlivé možnosti vypsali, ale bylo by to náročné. A proto tuto úlohu vyřešíme jen pomocí kombinací s opakováním. Máme $z = 9$ kuliček rozdělit do $n = 3$ přihrádek. Dostáváme:

$$C'_z(n) = \binom{z+n-1}{z} = \binom{9+3-1}{9} = \binom{11}{9} = \frac{11!}{9! \cdot 2!} = \frac{10 \cdot 11}{2} = 55.$$

Tento součet je realizován 55 způsoby, a proto je stupeň degenerace v tomto případě 55.

Poznámka: V úlohách jsme řešili vícedimenzionální harmonický oscilátor. U 2D a 3D pravoúhlé nekonečně hluboké potenciálové jámy je situace podstatně složitější. Sice se také jedná o separovatelný problém, ale energie je na kvantových číslech závislá kvadraticky (energie jednodimenzionální pravoúhlé nekonečné jámy ve stavu popsaném kvantovým číslem n je rovna $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2$, kde $n \in \mathbb{N}$). Stupeň degenerace nejde jednoduše určit a také nedosahuje tak vysokých hodnot jako v případě lineárního harmonického oscilátoru.

Vlnová funkce systému více nerozlišitelných částic

Protože v úlohách této části použijeme determinant, připomeneme si jeho definici a souvislost s kombinatorikou. Definici jsme převzali z učebnice (Bečvář, 2005).

Definice:

Nechť $A = (a_{ij})$ je čtvercová matice řádu n nad okruhem R.

Determinant $\det A$ matice A definujeme rovností

$$\det A = \sum_{P \in \mathbb{S}_n} \operatorname{sgn} P \cdot a_{P(1)1}\, a_{P(2)2} \dots a_{P(n)n.}$$

Poznámka: Okruh R je množina se dvěma binárními operacemi. První operací je sčítání, které má v množině R nulový prvek, všechny prvky opačné a je asociativní i komutativní. Druhou operací je násobení, po kterém požadujeme pouze oboustrannou distributivitu. Takovou množinou jsou například spojité funkce, se kterými budeme dále pracovat.

V součtu je $n!$ členů, protože se sčítá přes všechny permutace $P \in \mathbb{S}_n$ ($\mathbb{S}_n$ je množina všech permutací n prvků). V každém z těchto členů vystupuje v součinu právě jediný prvek z každého sloupce a zároveň právě jediný prvek z každého řádku matice A. Znaménko permutace je dané vztahem $\operatorname{sgn} P = (-1)^p$, kde p je počet inverzí v permutaci P. Inverzí v permutaci $P = \big(P(1), P(2), \dots, P(n)\big)$ rozumíme každou dvojici $\big(P(k), P(l)\big)$, pro kterou platí $(k < l)$ a zároveň $\big(P(k) > P(l)\big)$.

Pomocí definice napíšeme determinant pro matici řádu $n = 3$. Počet permutací je $P(3) = 3! = 6$. Budeme mít tedy součet 6 členů, kde tři permutace budou mít sudý počet inverzí a jejich znaménko tedy bude 1 a tři permutace budou mít lichý počet inverzí a jejich znaménko bude -1. Pro přehlednost si jednotlivé permutace uvedeme do tabulky 3.3 a uvedeme v ní i počet inverzí a konečné znaménko.

Tabulka 3.3: Jednotlivé permutace řádkových indexů.

permutace P	počet inverzí P	sgn P
$(1,2,3)$	0	1
$(2,3,1)$	2	1
$(3,1,2)$	2	1
$(3,2,1)$	3	-1
$(2,1,3)$	1	-1
$(1,3,2)$	1	-1

Teď příslušný determinant rozepíšeme, znaménka jsme již určili, stačí jen napsat jednotlivé členy. Dostáváme:

$$\begin{aligned}\det A = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{31}a_{12}a_{23} + a_{21}a_{32}a_{13} + \\ - a_{31}a_{22}a_{13} - a_{21}a_{12}a_{33} - a_{11}a_{32}a_{23}.\end{aligned} \tag{3.2}$$

Úloha 3.8: Jaký tvar bude mít vlnová funkce pro a) 2 nerozlišitelné bosony a b) 3 nerozlišitelné bosony? Vlnovou funkci systému několika bosonů sestavte z tzv. jednočásticových vlnových funkcí.

Řešení: Bosony jsou částice, které se mohou v daném systému nacházet ve stejném stavu. Bosony mají symetrický tvar vlnové funkce, tj. při výměně libovolné dvojice částic se vlnová funkce nikterak nemění. Čerpali jsme z knihy (Beiser, 1978). Pokud tedy chceme napsat vlnovou funkci, která by v sobě obsahovala možnost, že první částice je v nějakém stavu A, druhá ve stavu B atd., musíme tyto jednočásticové stavy vynásobit. Vzhledem k principiální nerozlišitelnosti bosonů nelze poznat, zda je ve stavu A první částice nebo nějaká jiná, proto je třeba uvažovat všechny možnosti, tj. sečíst součin jednočásticových vlnových funkcí pro všechny možné permutace částic.

a) V případě 2 bosonů uvažujme, že jeden je ve stavu A a druhý je ve stavu B. Tyto stavy si popíšeme pomocí jednočásticových vlnových funkcí: ψ_A a ψ_B. Pokud má být ve stavu A první částice, tj. částice se souřadnicemi $\vec{r_1}$, budeme to zkráceně zapisovat jako $\psi_A(1)$, apod. V této úloze je počet všech permutací částic $P(2) = 2! = 2$, konkrétně permutace $(1, 2)$ a $(2, 1)$. Vícečásticová vlnová funkce vyjádřená pomocí funkcí jednočásticových má tvar:

$$\Psi(1,2) = c\big(\psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1)\big),$$

kde c je komplexní konstanta taková, aby výsledná funkce byla normovaná, za předpokladu, že jednočásticové vlnové funkce ψ_A a ψ_B jsou normované ve svých prostorech, dostáváme $2|c|^2 = 1$, z toho vyplývá[1], že $c = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Vícečásticová vlnová funkce vyjádřená pomocí funkcí jednočásticových má tvar:

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1)\big).$$

b) V případě 3 bosonů uvažujme, že jeden je ve stavu A, druhý je ve stavu B a třetí je ve stavu C. Tyto stavy si popíšeme stejně jako výše pomocí jednočásticových vlnových funkcí: ψ_A, ψ_B a ψ_C. Počet všech permutací částic je $P(3) = = 3! = 6$, takže vlnová funkce bude mít 6 členů a jelikož se jedná o bosony, tak prohozením částic se vlnová funkce nemění, všechny členy tedy budou mít stejnou konstantu c a jelikož máme šest členů dostáváme $6|c|^2 = 1$, z toho

[1] Obecně platí, že $c = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha}$, kde $\alpha \in \mathbb{R}$, ale protože celková fáze vlnové funkce α není pro výpočty podstatná, volíme zde i v dalších úlohách variantu $\alpha = 0$ a příslušné konstanty vycházejí reálné kladné.

plyne, že $c = \frac{1}{\sqrt{6}} = \frac{1}{\sqrt{3!}}$. Konstantu u všech členů vytkneme a vícečásticová vlnová funkce vyjádřená pomocí funkcí jednočásticových má tvar:

$$\Psi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\big(\psi_A(1)\psi_B(2)\psi_C(3) + \psi_A(2)\psi_B(3)\psi_C(1) + \\ + \psi_A(3)\psi_B(1)\psi_C(2) + \psi_A(3)\psi_B(2)\psi_C(1) + \\ + \psi_A(2)\psi_B(1)\psi_C(3) + \psi_A(1)\psi_B(3)\psi_C(2)\big).$$

V případě bosonů si můžeme povšimnout, že vícečásticová vlnová funkce vyjádřená pomocí funkcí normovaných jednočásticových vypadá velmi podobně jako determinant (3.2), ale chybí zde znaménko permutace, protože při výměně dvou bosonů se nemění znaménko vlnové funkce, tedy všechny sčítance mají stejné znaménko. A také je zde oproti determinantu navíc normovací konstanta, která má tvar $1/\sqrt{N!}$, kde N je počet částic. Pokud nebudeme požadovat, aby vlnová funkce byla normovaná, normovací konstantu můžeme vynechat.

Úloha 3.9: Jaký tvar bude mít vlnová funkce pro a) 2 nerozlišitelné fermiony a b) 3 nerozlišitelné fermiony? Vlnovou funkci systému několika fermionů sestavte z tzv. jednočásticových vlnových funkcí.

Řešení: V případě fermionů znaménko permutace už musíme uvažovat, neboť při prohození dvou částic se musí změnit znaménko vlnové funkce, jelikož vlnová funkce fermionů je antisymetrická. Čerpali jsme z knihy (Beiser, 1978).

a) V případě 2 fermionů uvažujme, že jeden je ve stavu A a druhý je ve stavu B. Tyto stavy si popíšeme pomocí jednočásticových vlnových funkcí: ψ_A a ψ_B. Počet všech permutací je tedy $P(2) = 2! = 2$, tj. máme permutaci $(1, 2)$ a $(2, 1)$. Vícečásticová vlnová funkce vyjádřená pomocí funkcí jednočásticových má tvar:

$$\Psi(1,2) = c_1\psi_A(1)\psi_B(2) + c_2\psi_A(2)\psi_B(1),$$

kde $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$. Jelikož fermiony mají antisymetrickou vlnovou funkci, musí platit $c_1 = -c_2$. Pokud jsou jednočásticové funkce normované, z normovací podmínky pro funkci $\Psi(1,2)$ dostáváme $|c_1|^2 + |-c_1|^2 = 1$. Z toho vyplývá, že $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ a $c_2 = -c_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$. Konstanty vytkneme a získáme tvar vícečásticové vlnové funkce vyjádřené pomocí funkcí jednočásticových:

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left(\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_A(2)\psi_B(1)\right).$$

b) V případě 3 fermionů uvažujme, že jeden je ve stavu A, druhý je ve stavu B a třetí je ve stavu C. Tyto stavy si popíšeme pomocí jednočásticových vlnových funkcí: ψ_A, ψ_B a ψ_C. Počet všech permutací je $P(3) = 3! = 6$, takže vlnová funkce bude mít 6 členů a budeme mít tedy i 6 konstant, tři z nich budou mít kladné znaménko a tři z nich budou mít záporné znaménko (kvůli prohození částic), ale jejich velikost bude stejná a to $\frac{1}{\sqrt{6}} = \frac{1}{\sqrt{3!}}$. Konstanty vytkneme a vícečásticová vlnová funkce vyjádřená pomocí funkcí jednočásticových získá tvar:

$$\begin{aligned}\Psi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\big(&\psi_A(1)\psi_B(2)\psi_C(3) - \psi_A(2)\psi_B(1)\psi_C(3) + \\ &+ \psi_A(2)\psi_B(3)\psi_C(1) - \psi_A(3)\psi_B(2)\psi_C(1) + \\ &+ \psi_A(3)\psi_B(1)\psi_C(2) - \psi_A(1)\psi_B(3)\psi_C(2)\big).\end{aligned}$$

První člen má kladné znaménko, druhý člen má záporné znaménko (antisymetrie), neboť došlo k prohození první a druhé částice, třetí člen má kladné znaménko, neboť oproti prvnímu členu došlo ke dvěma prohození částic, čtvrtý člen má záporné znaménko, neboť oproti prvnímu členu došlo ke třem prohození částic, pátý člen má kladné znaménko, neboť oproti prvnímu členu došlo ke dvěma prohození částic a poslední člen má záporné znaménko, neboť oproti prvnímu členu došlo k jednomu prohození. Po přerovnání dostáváme:

$$\begin{aligned}\Psi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\big(&\psi_A(1)\psi_B(2)\psi_C(3) + \psi_A(2)\psi_B(3)\psi_C(1) + \\ &+ \psi_A(3)\psi_B(1)\psi_C(2) - \psi_A(3)\psi_B(2)\psi_C(1) + \\ &- \psi_A(2)\psi_B(1)\psi_C(3) - \psi_A(1)\psi_B(3)\psi_C(2)\big).\end{aligned}$$

Kladné znaménko mají ty permutace, které mají sudý počet inverzí, tj. první tři členy a záporné znaménko mají ty permutace, které mají lichý počet inverzí, tj. poslední tři členy. Rozepsaný tvar vícečásticové vlnové funkce velmi připomíná tvar determinantu (3.2) pro matici řádu $n = 3$. Determinant pro 3 fermiony si ještě rozepíšeme, aby to bylo dobře patrné.

Tvar determinantu pro 3 fermiony:

$$\begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_A(2) & \psi_A(3) \\ \psi_B(1) & \psi_B(2) & \psi_B(3) \\ \psi_C(1) & \psi_C(2) & \psi_C(3) \end{vmatrix} =$$

$$= \psi_A(1)\psi_B(2)\psi_C(3) + \psi_A(2)\psi_B(3)\psi_C(1) +$$
$$+ \psi_A(3)\psi_B(1)\psi_C(2) - \psi_A(3)\psi_B(2)\psi_C(1) +$$
$$- \psi_A(2)\psi_B(1)\psi_C(3) - \psi_A(1)\psi_B(3)\psi_C(2).$$

Jak můžeme vidět z rozepsaného determinantu pro 3 fermiony, vícečásticová vlnová funkce opravdu odpovídá determinantu.

Vícečásticovou vlnovou funkci pro fermiony vyjádřenou pomocí jednočásticových funkcí lze napsat pomocí determinantu, který se nazývá Slaterův determinant a zaručuje nám antisymetrii ve všech indexech. Pokud požadujeme normovanost vlnové funkce, pak je třeba Slaterův determinant vynásobit konstantou, která má pro N částic tvar $1/\sqrt{N!}$.

Obecný tvar Slaterova determinantu pro N fermionů:

$$\Psi(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_A(1) & \psi_A(2) & \cdots & \psi_A(N) \\ \psi_B(1) & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \psi_\triangle(1) & \dots & \dots & \psi_\triangle(N) \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{(\alpha,\beta,\dots,\boxdot)} \operatorname{sgn} P \cdot \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2) \cdot \dots \cdot \psi_\boxdot(N),$$

kde $(\alpha, \beta, \dots, \boxdot)$ jsou všechny permutace prvků $(A, B, \dots, \triangle)$, sgn P je znaménko konkrétní permutace a $\psi_A(1)$ je tzv. jednočásticová vlnová funkce částice 1, která je ve stavu A, apod.

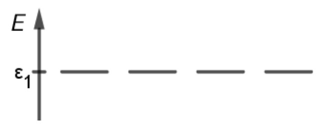
Kvantový systém pro rozlišitelné a nerozlišitelné částice

V této podkapitole budeme řešit úlohy týkající se kvantového systému pro rozlišitelné a nerozlišitelné částice. Nerozlišitelnými částicemi budou bosony či fermiony. Zároveň budeme tyto úlohy propojovat s typově stejnými úlohami z kapitoly 2 (úlohami zabývajícími se rostlinkami v květináčích a truhlících).

Nejprve si vysvětlíme, jaký je rozdíl mezi rozlišitelnými a nerozlišitelnými částicemi a jaký je rozdíl mezi fermiony a bosony. Rozlišitelné částice jsou takové částice, které se buď liší svými vlastnostmi, nebo pokud mají všechny vlastnosti stejné, tak si je můžeme pomyslně očíslovat či nějak jinak označit. Z toho plyne, že v případě rozlišitelných částic bude záležet na jejich uspořádání. Toto je typické pro klasické výpočty. Zatímco nerozlišitelné částice si nijak označit nemůžeme, všechny částice se nám jeví stejné a nemáme žádnou možnost, jak jednu odlišit od druhé. Toto je typické pro kvantové systémy. Fermiony se od bosonů liší tím, že žádné dva fermiony v jednom systému se nesmí nacházet ve stejném stavu, jedná se o tzv. Pauliho vylučovací princip, důsledek nerozlišitelnosti částic. Fermionem je například elektron. Na rozdíl od fermionů se v jednom systému může nacházet libovolný počet bosonů ve stejném stavu. Bosonem je například foton. To znamená, že bosony nemají omezení na počet částic v jednom stavu, u fermionů může být v daném stavu maximálně jeden.

Úloha 3.10: Kvantový systém obsahuje čtyři různé stavy se stejnou energií ε_1. Systém těchto energetických hladin je znázorněn na obrázku 3.3. Určete počet všech možností, jak může tyto čtyři různé stavy obsadit:

a) 6 rozlišitelných částic,
b) 6 bosonů.



Obrázek 3.3: Systém energetických hladin v úloze 3.10

Řešení:

a) Než se pustíme do řešení této úlohy, „přeložíme“ si ji do řeči rostlinek a květináčů. V řeči rostlinek a květináčů by se jednalo o úlohu, kdy bychom rostlinky sázeli do květináčů v kuchyni[2]. Tuto úlohu lze vyřešit pomocí vztahu (1.4) pro variace s opakováním.

[2] Protože v této úloze máme jen jednu hodnotu energie, kdežto v případě úlohy s rostlinkami kuchyň a obývák představovali různé energie a v květináčích nám nezáleželo na pořadí.

Máme tedy 6 rozlišitelných částic a 4 různé stavy, ve kterých se mohou nacházet, tj. každá částice si může vybrat ze 4 stavů, půjde tedy o variace s opakováním $V'_k(n) = V'_6(4) = 4^6 = 4\,096$. Počet možností je v tomto případě 4 096.

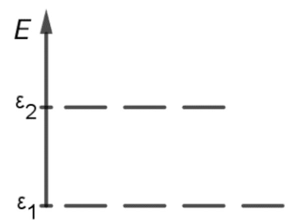
b) Tato úloha je podobná úloze, kdy jsme měli nerozkvetlé (tedy nerozlišitelné) rostlinky zasadit například do 4 květináčů v kuchyni a zajímalo nás jen, kolik rostlinek je v jednotlivých květináčích. Jednalo se o typ úlohy 2.8, kterou jsme vyřešili pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním.

Máme tedy 6 nerozlišitelných částic a 4 různé stavy. Lze si to představit tak, že máme k nerozlišitelných předmětů rozmístit do n přihrádek. V této úloze máme tedy 6 nerozlišitelných částic rozdělit do 4 přihrádek reprezentující 4 různé stavy. Pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním dostáváme:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{6+4-1}{6} = \binom{9}{6} = \frac{9!}{6!\cdot 3!} = \frac{7\cdot 8\cdot 9}{2\cdot 3} = 84.$$

Úloha 3.11: Kvantový systém obsahuje čtyři různé stavy s energií ε_1 a tři různé stavy s energií ε_2. Systém těchto energetických hladin je znázorněn na obrázku 3.4. Určete počet všech možností, jak může tyto stavy obsadit:

a) 9 rozlišitelných částic,
b) 9 bosonů,
c) 5 fermionů.



Obrázek 3.4:Systém energetických hladin v úloze 3.11

Řešení:

a) Tato úloha je totožná jako úloha 2.7, ve které jsme místo obsazování stavů částicemi, sázeli rostlinky do květináčů. V této úloze máme určit počet všech možností, jak může 9 rozlišitelných částic obsadit 7 stavů (4 stavy s energií ε_1

a 3 stavy s energií ε_2). Tuto úlohu lze vyřešit pomocí vztahu (1.4) pro variace s opakováním. Každá částice si může vybrat ze 7 stavů. Dostáváme:

$$V_k'(n) = V_9'(7) = 7^9 = 40\,353\,607.$$

b) Tato úloha je totožná jako úloha 2.8, pouze místo sázení rostlinek, obsazujeme stavy částicemi. Máme tedy 9 nerozlišitelných částic a 7 různých stavů. Můžeme si to představit tak, že k předmětů máme rozmístit do n přihrádek. Pro výpočet použijeme vztah (1.6) pro kombinace s opakováním a dostáváme:

$$C_k'(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{9+7-1}{9} = \binom{15}{9} = \frac{15!}{9! \cdot 6!} = 5\,005.$$

c) Tato úloha je podobná úloze 2.10. Celkem máme 7 různých stavů a v každém z nich může být maximálně jeden fermion. Z těch 7 stavů chceme vybrat 5 stavů, které fermiony obsadí. K výpočtu použijeme vztah (1.3) pro kombinace a dostáváme:

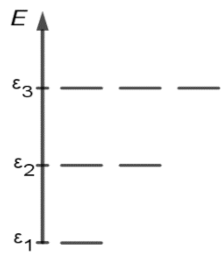
$$C_k(n) = C_5(7) = \binom{7}{5} = \frac{7!}{5! \cdot 2!} = \frac{6 \cdot 7}{2} = 21.$$

Úloha 3.12: Kvantový systém obsahuje jeden stav s energií ε_1, dva různé stavy s energií ε_2 a tři různé stavy s energií ε_3. Systém těchto energetických hladin je znázorněn na obrázku 3.5. Určete počet všech možností, jak mohou tyto stavy obsadit:

a) 3 rozlišitelné částice,

b) 3 bosony,

c) 3 fermiony.



Obrázek 3.5: Systém energetických hladin v úloze 3.12

Řešení:

a) Oproti předchozí úloze máme místo dvou energií tři, ale to nic nemění na způsobu řešení. Celkem máme 6 různých stavů a 3 rozlišitelné částice. Každá ze 3 částic má 6 možností, který stav může obsadit. Pomocí vztahu (1.4) pro variace s opakováním dostáváme:

$$V_k'(n) = V_3'(6) = 6^3 = 216.$$

b) Teď máme určit počet možností, jak lze 3 bosony obsadit 6 různých stavů. Toto určíme pomocí vztah (1.6) pro kombinace s opakováním, neboť se jedná o 3 nerozlišitelné částice (předměty) a 6 různých stavů (přihrádek). Dostáváme tedy:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{3+6-1}{3} = \binom{8}{3} = \frac{8!}{5! \cdot 3!} = \frac{6 \cdot 7 \cdot 8}{6} = 56.$$

c) V případě fermionů máme obsadit 3 fermiony 6 různých stavů. Bude nás tedy zajímat, jak z 6 stavů vybrat 3 stavy, které obsadí 3 fermiony. Pomocí vztahu (1.3) pro kombinace dostáváme:

$$C_k(n) = C_3(6) = \binom{6}{3} = \frac{6!}{3! \cdot 3!} = \frac{4 \cdot 5 \cdot 6}{6} = 20.$$

4. Úlohy na procvičení pojmů mikrostav a makrostav

V této kapitole si nejdříve vysvětlíme potřebné pojmy a vztahy a poté se budeme věnovat příkladům, ve kterých budeme tyto pojmy a vztahy používat.

Začneme s vysvětlením pojmů makrostav, mikrostav a soubor. Makrostav je to, co naměříme, když se na systém koukáme jako na celek, příkladem může být celková energie systému. Mikrostav nám dává tu nejdetailnější informaci o daném systému, například konkrétně víme, které částice jak obsadily energetické hladiny. Soubor je množina všech možných mikrostavů.

Pojem makrostav, mikrostav a soubor si budeme ještě ilustrovat na konkrétním příkladě. Mějme částice a systém, který je rozdělený pomyslnou přepážkou na pravou a levou stranu. K určení makrostavu nám stačí vědět, kolik částic je vlevo a kolik vpravo. Mikrostav je určen, pokud víme, které konkrétní částice jsou vlevo a které vpravo. Dává nám detailní informaci o tom systému. A soubor zahrnuje, všechny možnosti, jak mohou být částice rozloženy.

Úloha 4.1: Máme dvě hrací kostky, obě mají 6 ok. Oběma kostkami budeme házet najednou a bude nás zajímat počet mikrostavů a makrostavů. Mikrostav je charakterizován počtem ok, které padnou na každé kostce a za makrostav budeme považovat součet ok, které padnou na obou kostkách. Určete všechny možné mikrostavy (tedy soubor) a počet makrostavů.

Řešení: Začneme nejprve určením počtu makrostavů a mikrostavů. Poté určíme, kolika mikrostavy jsou dané makrostavy realizované. Makrostav nám dává informaci o tom, jaký je součet ok, které padly na kostkách. Nejmenší součet, který může padnout, je 2 a největší součet, který může padnout, je 12. Celkem tedy máme 11 makrostavů. Jednotlivé součty jsou 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 a 12.

Jeden z možných mikrostavů je, že na první kostce padlo číslo 1 a na druhé kostce také padlo číslo 1. Celkový počet mikrostavů (tedy velikost souboru) se určí tak, že si řekneme, kolik čísel může padnout na první kostce a kolik čísel může padnout na druhé kostce a tyto počty mezi sebou vynásobíme. Jelikož obě kostky mají 6 různých stran, tak celkový počet mikrostavů je $6 \cdot 6 = 36$.

Tuto úlohu lze také řešit výčtem. Tuto metodu si ukážeme, abychom viděli, že to odpovídá tomu, co jsme již zjistili. Znázorníme si to tabulkou (viz tabulka 4.1 a tabulka 4.2).

Tabulka 4.1: Počty makrostavů a mikrostavů při hodech dvěma kostkami. V prvním řádku jsou vypsané jednotlivé počty ok, které mohou padnout na první kostce a v prvním sloupci jsou vypsané jednotlivé počty ok, které mohou padnout na druhé kostce. Čísla v ostatních políčkách udávají možné součty ok, například poslední políčko s číslem 12 vzniklo jakou součet posledního políčka v prvním řádku a posledního políčka v prvním sloupci. V tabulce jsou různými barvami zvýrazněny makrostavy. Jedné barvě odpovídá jeden makrostav. To kolikrát se jedna barva opakuje udává počet mikrostavů, které dané makrostavy realizují.

	1	2	3	4	5	6
1	2	3	4	5	6	7
2	3	4	5	6	7	8
3	4	5	6	7	8	9
4	5	6	7	8	9	10
5	6	7	8	9	10	11
6	7	8	9	10	11	12

Tabulka 4.2: V prvním řádku jsou vypsané jednotlivé makrostavy, které jsme označili velkými písmeny, abychom je od sebe odlišili a zároveň jsou barevně označené jako v tabulce 4.1. V druhém řádku jsou napsané počty mikrostavů, které konkrétní makrostavy realizují.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	2	3	4	5	6	5	4	3	2	1

Tabulka 4.1 a tabulka 4.2 nám dává informaci o tom, že makrostavů je celkem 11. Pokud sečteme počty mikrostavů pro jednotlivé makrostavy, tak dostaneme 36, stejně jako nám vyšlo výše výpočtem.

Úloha 4.2: Uvažujme systém, který je tvořený 3 částicemi, které jsou všechny ve stavu s energií $E = 0$. Do systému dodáme 6 stejně velkých kvant energie, které si mezi sebou tyto částice rozdělí. Určete počet makrostavů a mikrostavů systému po přijetí těchto kvant, pokud jsou částice: a) rozlišitelné a b) nerozlišitelné.

Řešení: Pro oba typy částic máme jen jediný makrostav, který je charakterizován celkovou energií systému, tj. 6 kvanty energie.

a) V případě rozlišitelných částic budeme tuto úlohu řešit tak, že budeme chtít 6 kvant energie rozdělit mezi 3 částice (tedy do 3 přihrádek). Je to podobné jako úloha 2.8, kdy jsme chtěli rostlinky zasadit do květináčů a zajímal nás jen počet rostlinek v květináčích, ne konkrétní rozmístění. K jejímu vyřešení jsme použili vztah (1.6) pro kombinace s opakováním. V naší úloze tedy máme $k = 6$ a $n = 3$. Dostáváme:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{6+3-1}{6} = \binom{8}{6} = \frac{8!}{6! \cdot 2!} = \frac{7 \cdot 8}{2} = 28.$$

Počet všech mikrostavů je tedy 28.

b) V případě nerozlišitelných částic si jednotlivé možnosti, jak lze tento makrostav realizovat, vypíšeme do tabulky 4.3 a vidíme, že počet mikrostavů je 7.

V případě nerozlišitelných částic je počet mikrostavů menší než v případě rozlišitelných částic, protože pokud bychom vypsáním do tabulky řešili tuto úlohu i pro rozlišitelné částice. Bylo by potřeba započítat jednotlivá „uspořádání“. Například v případě, kdy mají dvě částice 0 kvant energie a jedna částice 6 kvant energie, bychom museli započítat tři možnosti, která částice má oněch 6 kvant energie. V případě nerozlišitelných částic neřešíme, která konkrétní částice má kolik kvant, neboť si jednotlivé částice nemůžeme nijak označit.

Tabulka 4.3: Mikrostavy realizující makrostav se 6 kvanty energie. Do tabulky jsou možnosti realizující zadaný makrostav zapsány pomocí 3 kuliček, které reprezentují nerozlišitelné částice. Z tabulky je vidět, že tento makrostav lze realizovat 7 různými způsoby. Počet mikrostavů je tedy 7.

počet částic s daným počtem kvant							součty energie
0	1	2	3	4	5	6	
••						•	0 + 0 + 6
•	•				•		0 + 1 + 5
•		•		•			0 + 2 + 4
	••			•			1 + 1 + 4
•			••				0 + 3 + 3
	•	•	•				1 + 2 + 3
		•••					2 + 2 + 2

Takto by to bylo v případě, že by nerozlišitelné částice byly bosony. V případě, že by nerozlišitelné částice byly fermiony, záleželo by na tom, zda jsou povolené energie degenerované a je tedy možné, aby dva fermiony měly stejnou energii (protože by byly v různých stavech). Pokud by k degeneraci energie nedocházelo, nemohly by nastat mikrostavy, kdy má více fermionů stejný počet kvant energie, tj. byl by možný jen mikrostav na druhém, třetím a šestém řádku v tabulce 4.3. Celkem by tedy tento makrostav byl realizovaný 3 mikrostavy.

Úloha 4.3: Máme 100 rozlišitelných částic v krabici, která je rozdělená na pravou a levou část. Částice se mohou nacházet buď v levé, anebo v pravé části krabice. Mikroskopicky umíme u každé částice určit jen to, jestli je v levé nebo v pravé části krabice. Makroskopicky umíme určit pouze počet částic vlevo a vpravo, nikoli o které částice se jedná. Určete počet všech mikrostavů a makrostavů tohoto systému.

Řešení: Nejprve určíme počet mikrostavů. Pro každou částici máme na výběr ze dvou možností, kam ji umístit, buď do levé, anebo pravé části krabice. Jelikož částic je 100, tak počet mikrostavů je $2^{100} \approx 1{,}27 \cdot 10^{30}$. Je to podobné tomu, když jsme v úloze 2.7 zasazovali rostlinky do květináčů a zajímalo nás, kde která rostlinka je. V této úloze máme pro každou částici 2 místa, kde může být. Pokud bychom tuto úlohu chtěli řešit pomocí konkrétního vztahu, použili bychom vztah (1.4) pro variace s opakováním.

Makrostav určíme tak, že nás zajímá, kolik částic je vlevo a kolik vpravo, nezajímá nás konkrétní rozmístění částic. Je to podobné jako úloha 2.9, kde jsme měli rostlinky zasadit do kuchyně, nebo obýváku a záleželo nám jen na počtu rostlinek v místnostech. Tato úloha šla řešit pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním anebo výčtem. Při řešení výčtem dostaneme tyto možnosti: 0 částic vlevo (100 vpravo), 1 částice vlevo (99 vpravo), 2 částice vlevo (98 vpravo), …, 100 částic vlevo (0 vpravo), což dává 101 možností. Při řešení úlohy pomocí kombinací s opakováním máme 100 „koleček“ a 2 „přihrádky. Dostáváme tedy: $\binom{100+2-1}{100} = \binom{101}{100} = 101$.

V případě, že by se jednalo o nerozlišitelné částice, počet mikrostavů by splynul s počtem makrostavů. Dostali bychom tedy, že počet mikrostavů je 101, stejně jako počet makrostavů.

Úloha 4.4: Máme 2 rozlišitelné částice, které si mohou vybrat, zda budou v levé části, uprostřed nebo v pravé části krabice. Pravděpodobnost, že konkrétní částice bude v konkrétní části krabice, je ve všech případech 1/3. Určete:

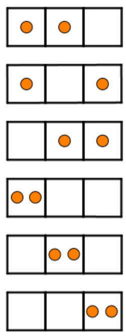
a) počet všech mikrostavů,
b) počet všech makrostavů (makrostav určují jen počty částic v jednotlivých částech, ne to, o které částice se konkrétně jedná).

Řešení:

a) Tato úloha je podobná úloze s rostlinkami, které jsme sázeli do květináčů a záleželo nám na tom, která rostlinka je v kterém květináči (úloha 2.7), ale v této úloze místo do 7 květináčů sázíme do 3 květináčů. Počet všech mikrostavů určíme z faktu, že každá částice má na výběr ze 3 částí krabice. Jelikož částice jsou 2, tak počet všech mikrostavů je $3^2 = 9$, jedná se tedy o variace s opakováním.

b) V tomto případě nás nezajímá, konkrétní umístění částic, ale jen jejich počet v jednotlivých částech krabice, je to podobné jako úloha 2.8, kdy nás také zajímali jen počty rostlinek v květináčích. Lze se na to dívat tak, že máme 2 částice a 3 přihrádky. Jednotlivé makrostavy jsme znázornili na obrázku 4.1. Anebo k určení počtu makrostavů použijeme vztah (1.6) pro kombinace s opakováním. Dostáváme:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{2+3-1}{2} = \binom{4}{2} = \frac{4!}{2! \cdot 2!} = \frac{3 \cdot 4}{2} = 6.$$



Obrázek 4.1: Jednotlivé makrostavy pro 2 částice

Úloha 4.5: Máme 8 rozlišitelných částic v krabici, která je rozdělena na čtyři části A, B, C a D. Pravděpodobnost, že konkrétní částice bude v konkrétní části krabice, je ve všech případech 1/4. Určete:

a) Počet mikrostavů odpovídající tomu, že počty částic v jednotlivých částech krabice jsou 3 částice v části A, 1 částice v části B, 2 částice v části C a 2 částice v části D.
b) Počet všech možných mikrostavů.
c) Počet všech makrostavů (makrostav určují jen počty částic v jednotlivých částech, ne to, o které částice se konkrétně jedná).

Řešení:

a) Tato úloha je podobná jako když si naše kamarádka chtěla vzít 3 rostlinky a bylo jedno, v jakém pořadí se rostlinky vybere (úloha 2.5). V této úloze také máme dáno, kolik má být částic, v které části krabice. Bylo by to stejné jako kdybychom měli více kamarádek a první kamarádka by si vzala 3 rostlinky a druhá 1 rostlinku atd. V části A vybíráme 3 částice z 8 pomocí vztahu (1.3) pro kombinace, neboť vybíráme neuspořádanou trojici z osmi částic. V části B vybíráme 1 částici, ale už jen z 5 částic, protože jsme z celkového počtu 8 částic již 3 vybrali v části A. V části C vybíráme 2 částice ze 4, neboť v předchozích dvou částech jsme již 4 částice vybrali. V poslední části D vybíráme 2 částice ze 2, protože to jsou poslední částice, které jsme ještě nevybrali. Pomocí kombinatorického pravidla součinu dostáváme:

$$\binom{8}{3} \cdot \binom{5}{1} \cdot \binom{4}{2} \cdot \binom{2}{2} = 56 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 1 = 1680.$$

b) Tato úloha je podobná úloze 2.7, kdy jsme rostlinky sázeli do 7 květináčů a bylo pro nás podstatné, ve kterém květináči se která rostlinka nachází, jednalo se o variace s opakováním (vztah (1.4)). V této úloze máme celkem 4 možnosti (části A, B, C a D), kde se částice mohou v krabici nacházet, takže každá z 8 částic si může vybrat ze 4 možností. Dostáváme:

$$4^8 = 65\,536.$$

c) Tato úloha je podobná úloze, ve které jsme sázeli rostlinky do květináčů a zajímal nás je počet rostlinek v jednotlivých květináčích (úloha 2.8). V této úloze nám jde taky jen o počty částic v jednotlivých částech krabice. Lze se na to dívat tak, že máme 8 částic (stejných, jelikož nás zajímají jen počty částic) rozdělit do 4 přihrádek. K určení počtu použijeme vztah (1.6) pro kombinace s opakováním. Dostáváme:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{8+4-1}{8} = \binom{11}{8} = \frac{11!}{8! \cdot 3!} = \frac{9 \cdot 10 \cdot 11}{2 \cdot 3} = 165.$$

Úloha 4.6: Určete počet všech mikrostavů, pokud uvažujeme 3 částice v konečné potenciálové jámě, kde je 5 povolených stavů, s různými energiemi. Úlohu řešte pro

a) rozlišitelné částice,
b) nerozlišitelné fermiony,
c) nerozlišitelné bosony.

Řešení:

a) Tato úloha je podobná úloze 2.7, kdy jsme měli rostlinky sázet do 7 květináčů (4 v kuchyni a 3 v obýváku), ale teď bychom tuto úlohu měli formulovanou tak, že bychom měli 5 místností a v každé by byl jeden květináč, do kterého by šlo zasadit i všechny rostlinky najednou. Tato úloha se řešila pomocí variací s opakováním (vztah (1.4)) anebo také tak, že si řekneme, že pro každou částici máme 5 povolených stavů, které může obsadit. V případě rozlišitelných částic má každá částice na výběr z 5 povolených stavů a částice máme 3, dostáváme:

$$5^3 = 125.$$

b) V případě fermionů si musíme uvědomit, že žádné 2 fermiony nesmí být ve stejném stavu a že se jedná o nerozlišitelné částice. Tato úloha je podobná úloze 2.10, kdy jsme jednotlivé nerozlišitelné rostlinky sázeli do květináčků, kde mohla být maximálně jedna rostlinka. Takže nám nezáleží na pořadí a prvky se neopakují, bude se tedy jednat o kombinace, kdy z 5 povolených hladin vybíráme 3, na které se ty 3 fermiony umístí, tedy dostáváme:

$$\binom{5}{3} = \frac{5!}{3! \cdot 2!} = \frac{4 \cdot 5}{2} = 10.$$

c) V případě bosonů se jedná o nerozlišitelné částice a dva bosony mohou být ve stejném stavu. Je to podobná úloha jako když jsme sázeli rostlinky do květináčů a zajímali nás jen počty rostlinek v jednotlivých květináčích (úloha 2.8), šlo tedy o kombinace s opakováním. Pomocí kolleček a přihrádek to lze vysvětlit tak, že máme 3 nerozlišitelné částice $(k = 3)$ rozdělit do 5 přihrádek $(n = 5)$. Podle vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním dostáváme:

$$\binom{3+5-1}{3} = \binom{7}{3} = \frac{7!}{3! \cdot 4!} = \frac{5 \cdot 6 \cdot 7}{2 \cdot 3} = 35.$$

Úloha 4.7: Určete počet všech makrostavů, pokud uvažujeme 3 částice v konečné potenciálové jámě, ve které je právě 5 povolených stavů, s různými energiemi. Tedy stejná situace jako v předchozí úloze. Uvažujte, že se jedná o

a) rozlišitelné částice,
b) nerozlišitelné fermiony,
c) nerozlišitelné bosony.

Řešení:

a) V případě rozlišitelných částic nám teď nezáleží na tom, kde které částice je, ale jen to, kolik jich je v jednotlivých povolených stavech, protože to bude rozhodovat o celkové energii systému. Tedy se jedná o stejný problém jako hledání počtu mikrostavů pro bosony. To jsme určili pomocí kombinací s opakováním (vztah (1.6)). Dostáváme:

$$\binom{3+5-1}{3} = \binom{7}{3} = \frac{7!}{3! \cdot 4!} = \frac{5 \cdot 6 \cdot 7}{2 \cdot 3} = 35,$$

Počet makrostavů pro fermiony, resp. bosony je stejný jako příslušné počty mikrostavů v předchozí úloze 4.6.V této úloze nás zajímají jen počty částic v jednotlivých povolených stavech, protože to rozhoduje o celkové energii systému. Tyto počty jsme již určili v předchozí úloze, neboť u nerozlišitelných částic nezáleží na uspořádání.

Úloha 4.8: Mějme 7 částic, které mohou obsazovat 2 různé energetické hladiny. Energetická hladina E_1 je šestkrát degenerovaná a energetická hladina E_2 je třikrát degenerovaná. Kolik má tento systém mikrostavů a makrostavů, pokud se jedná o:

a) rozlišitelné částice,
b) nerozlišitelné fermiony,
c) nerozlišitelné bosony?

Řešení:

a) Při určení počtu mikrostavů si uvědomíme, že je to podobná úloha, jako když jsme sázeli rostlinky do květináčů v kuchyni a obývácku a do každého květináče se mohly zasadit všechny rostlinky (úloha 2.7), v tomto případě jsme použili vztah (1.4) pro variace s opakováním. Zde částice mohou obsadit celkem 9 hladin, jelikož hladina E_1 je 6krát degenerovaná a hladina E_2 je 3krát degenerovaná, tedy každá částice má 9 možností, kde se může nacházet, celkem tedy dostáváme:

$$9^7 = 4\,782\,969 \text{ mikrostavů.}$$

Při určení počtu makrostavů si uvědomíme, že je to podobná úloha, jako když jsme sázeli rostlinky do 4 květináčů v kuchyni a 3 květináčů v obýváku a zajímalo nás jen kolik rostlinek je v kuchyni a kolik v obýváku (úloha 2.9). Tuto úlohu jsme vyřešili pomocí kombinací s opakováním (vztah (1.6)). V této úloze tedy pro nás budou částice nerozlišitelné, protože nám je jedno, ve kterém stavu konkrétně se která částice nachází, podstatná je pouze energetická hladina. Energetické hladiny jsou v této úloze 2. Máme tedy 7 nerozlišitelných částic ($k = 7$) a 2 energetické hladiny ($n = 2$). Dostáváme tedy:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{7+2-1}{7} = \binom{8}{7} = 8.$$

b) Při určování počtu mikrostavů pro fermiony si uvědomíme, že je to podobná úloha, jako když jsme sázeli rostlinky do květináčků, kde mohla být maximálně jedna rostlinka. V úloze 2.10 záleželo jen na tom, které květináčky jsou plné a které prázdné, tedy nezajímalo nás rozmístění jednotlivých rostlinek. A u fermionů nám také na uspořádání nezáleží a žádné 2 fermiony nesmí být ve stejném stavu. Tuto úlohu tedy vyřešíme pomocí vztahu (1.3) pro kombinace, kdy máme celkem 9 míst, kam můžeme těch 7 fermionů umístit, tj. vybíráme 7 míst z 9. Dostáváme:

$$C_k(n) = C_7(9) = \binom{9}{7} = \frac{9!}{7! \cdot 2!} = \frac{8 \cdot 9}{2} = 36.$$

Další pohled na tuto úlohu může být takový, že vybíráme 7 stavů z 9, kam těch 7 fermionů můžeme umístit anebo také tak, že vybíráme 2 stavy, které nebudou obsazené.

Při určování počtu makrostavů si uvědomíme, že je to podobná úloha, jako když jsme měli zasadit rostlinky do květináčků, kam se vešla maximálně jedna rostlinka, ale nás zajímal jen počet rostlinek v chodbě a počet rostlinek v ložnici (úloha 2.12). V této úloze máme 2 energetické hladiny, které jsou degenerované. Úlohu vyřešíme pomocí tabulky 4.4, ze které je vidět, že máme 3 makrostavy.

Tabulka 4.4: Jednotlivé možné makrostavy. V tabulce jsou ve sloupci E_1 napsané počty fermionů, které obsadily hladinu E_1, která je 6krát degenerovaná a v sloupci E_2 jsou napsané počty fermionů, které obsadily hladinu E_2, která je 3krát degenerovaná.

E_1	E_2
6	1
5	2
4	3

c) Při určování počtu mikrostavů pro bosony si uvědomíme, že je to podobná úloha, jako když jsme rostlinky sázeli do 4 květináčů v kuchyni a 3 květináčů v obýváku a zajímaly nás jen počty rostlinek v jednotlivých květináčích (úloha 2.8). Úlohu jsme řešili pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním. V této úloze máme 7 bosonů, což jsou nerozlišitelné částice, které mohou být ve stejném stavu a celkem 9 míst, kde se mohou nacházet. Jde vlastně o úlohu, kdy chceme 7 nerozlišitelných částic (koleček) rozdělit do 9 přihrádek. Dostáváme:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{7+9-1}{7} = \binom{15}{7} = 6\,435.$$

Při určení počtu makrostavů si uvědomíme, že je to podobná úloha, jako když jsme sázeli rostlinky do květináčů v kuchyni a květináčů v obýváku, ale zajímal nás jen počet rostlinek v kuchyni a počet rostlinek v obýváku (Úloha 2.9). Tuto úlohu jsme řešili pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním.

V této úloze máme 7 bosonů a 2 energetické hladiny a zajímají nás jen počty částic na těchto 2 hladinách. Máme tedy 7 nerozlišitelných částic ($k = 7$) a 2 energetické hladiny ($n = 2$). Dostáváme tedy:

$$C'_k(n) = \binom{k+n-1}{k} = \binom{7+2-1}{7} = \binom{8}{7} = 8.$$

Úloha 4.9: Uvažujme systém s 10 rozlišitelnými částicemi v krabici. Krabice je rozdělená na 2 části, na pravou a levou. Částice mohou libovolně přecházet z levé části krabice do pravé a naopak.

a) Určete počet všech mikrostavů a makrostavů pro celý systém a také určete počet mikrostavů pro jednotlivé makrostavy (makrostav je v tomto případě dán počtem částic vlevo a vpravo).

b) Ukažte, že rovnovážný (makro)stav lze realizovat největším počtem mikrostavů.

Řešení:

a) Celkový počet makrostavů je 11, neboť můžeme mít 0 částic vlevo (10 vpravo), 1 částici vlevo (9 vpravo), 2 částice vlevo (8 vpravo), …, 10 částic vlevo (0 vpravo).

   A počet všech mikrostavů je $2^{10} = 1\,024$, neboť každá částice má na výběr ze 2 možností, kde se může nacházet (v levé nebo v pravé části krabice) a celkem máme 10 částic. Jednotlivé makrostavy s možnostmi jejich realizace si uvedeme do tabulky 4.5.

b) V naší úloze bychom intuitivně řekli, že rovnováha nastává v případě, kdy máme 5 částic vlevo a 5 částic vpravo. Jedná se o makrostav F (viz tabulka 4.5) a jak lze vidět, jedná se o makrostav, který je realizovaný největším počtem mikrostavů. V naší úloze mají všechny mikrostavy stejnou pravděpodobnost, že nastanou. Rovnovážný makrostav nastává tedy ze všech makrostavů nejpravděpodobněji.

Tabulka 4.5: V prvním sloupci tabulky máme jednotlivé makrostavy, které jsme si označili pomocí velkých písmen. V druhém sloupci označeném N_L jsou počty částic v levé části krabice. Ve třetím sloupci označeném N_P jsou počty částic v pravé části krabice, přičemž musí platit, že $N_P = 10 - N_L$. V posledním sloupci jsou počty mikrostavů, kterými lze jednotlivé makrostavy realizovat. Počet mikrostavů se určí pomocí tohoto vztahu: $\binom{10}{N_L}\binom{10-N_L}{N_P} = \binom{10}{N_L}\binom{N_P}{N_P} = \binom{10}{N_L}$. Například počet mikrostavů pro 2 částice vlevo se spočte tak, že z 10 částic chceme vybrat 2, které budou vlevo, a ty vybereme pomocí $\binom{10}{2} = 45$ kombinací a zbytek 8 částic už musí být vpravo, a to lze vybrat právě jedním způsobem, neboť vybíráme 8 částic z 8, které budou vpravo. Počet mikrostavů je tedy v tomto případě 45. V posledním řádku jsou uvedeny celkové počty makrostavů a mikrostavů.

makrostav	N_L	N_P	počet mikrostavů
A	0	10	1
B	1	9	10
C	2	8	45
D	3	7	120
E	4	6	210
F	5	5	252
G	6	4	210
H	7	3	120
I	8	2	45
J	9	1	10
K	10	0	1
11			1 024

Z tabulky 4.5 dostáváme, že celkem máme 11 makrostavů a 1 024 možných mikrostavů, což odpovídá tomu, co jsme již spočetli na začátku této úlohy.

Úloha 4.10: Máme dva systémy S_1 a S_2. Oba se skládají z částic se spinem 1/2, jehož průmět může nabývat pouze dvou hodnot, a to nahoru a dolů. První systém S_1 se skládá ze 2 částic a druhý systém S_2 se skládá ze 4 částic. Energie částice se spinem v magnetickém poli závisí na hodnotě spinu (natočení šipky, kterou budeme spin zakreslovat). Oba systémy si mohou vzájemně vyměňovat energii, ale nevyměňují si energii s okolím (počet „šipek“ nahoru v obou systémech dohromady se zachovává).
Jedno z možných rozložení částic v systémech S_1 a S_2.

$$S_1 : \uparrow\uparrow \qquad\qquad S_2 : \uparrow\downarrow\ \ \downarrow\downarrow$$

a) Určete počet mikrostavů pro jednotlivé makrostavy. Makrostav je v této úloze charakterizován počtem částic s oběma možnými průměty spinu v obou systémech.
b) Ukažte, že rovnovážný stav má nejvyšší počet mikrostavů.

Řešení:

a) Protože si systémy nevyměňují energii s okolím, ale pouze mezi sebou musíme zachovat celkový počet „šipek“ nahoru a dolů v obou systémech dohromady. Tedy ve všech mikrostavech musí být celkově 3 šipky nahoru. Výměna energie mezi systémy umožňuje otočení šipek v obou systémech. Makrostavy máme 3, pro přehlednost si je znázorníme a pojmenujeme.

A: $S_1 : \uparrow\uparrow$ $S_2 : \uparrow\downarrow \;\; \downarrow\downarrow$

B: $S_1 : \uparrow\downarrow$ $S_2 : \uparrow\uparrow \;\; \downarrow\downarrow$

C: $S_1 : \downarrow\downarrow$ $S_2 : \uparrow\uparrow \;\; \uparrow\downarrow$

Makrostav je dán celkovou energií systému S_1 a S_2, tedy jen „počtem šipek nahoru“ v systému S_1.

Makrostav A

V systému S_1 chceme umístit 2 částice se spinem nahoru, chceme tedy vybrat 2 místa ze 2, kam můžeme tyto částice umístit, tj. $\binom{2}{2} = 1$.

V systému S_2 musíme umístit 1 částici se spinem nahoru, chceme tedy vybrat 1 místo ze 4, kam tuto částici umístíme, tj. $\binom{4}{1} = 4$.

Makrostav A lze tedy realizovat $1 \cdot 4 = 4$ mikrostavy.

Makrostav B

V systému S_1 chceme umístit 1 částici se spinem nahoru, tj. $\binom{2}{1} = 2$.

V systému S_2 musíme umístit 2 částice se spinem nahoru, tj. $\binom{4}{2} = \frac{4!}{2! \cdot 2!} = 6$.

Makrostav B lze tedy realizovat $2 \cdot 6 = 12$ mikrostavy.

Makrostav C

V systému S_1 chceme umístit 0 částic se spinem nahoru, tj. $\binom{2}{0} = 1$.

V systému S_2 musíme umístit 3 částice se spinem nahoru, tj. $\binom{4}{3} = 4$.

Makrostav C lze tedy realizovat $1 \cdot 4 = 4$ mikrostavy.

b) Z řešení předchozí části této úlohy vidíme, že makrostav označený B je realizován nejvyšším počtem mikrostavů. A jak je vidět, jedná se o makrostav reprezentující rovnovážný stav, protože v systému S_1, který je poloviční oproti systému S_2, je jedna částice se spinem nahoru a jedna částice se spinem dolů a v systému S_2 jsou dvě částice se spinem nahoru a dvě částice se spinem dolů.

5. Kanonická a grandkanonická statistická suma

V této kapitole budeme řešit úlohy týkající se hledání kanonické statistické sumy, grandkanonické statistické sumy a entropie. Nejprve si jednotlivé pojmy připomeneme a poté budeme řešit úlohy. Při psaní této kapitoly jsme čerpali ze skript k statistické fyzice (Koupilová, a další, (n. d)) a (Koupilová, n. d.).

Kanonická statistická suma

V této podkapitole si nejprve připomeneme, co je to kanonický soubor, jaký tvar má kanonická rozdělovací funkce a statistická suma. A poté již budeme řešit úlohy, které se týkají statistické sumy.

Kanonický soubor je soubor všech mikrostavů, ve kterých se může nacházet systém, který si se svým okolím může vyměňovat energii, ale nedochází k výměně částic. Definici jsme převzali ze skript (Koupilová, a další, (n. d)).

Kanonická rozdělovací funkce závisí jen na celkové energii systému v daném mikrostavu a má tvar:

$$\rho(E) = Ae^{-\beta E},$$

kde A je normovací konstanta, E je energie systému v daném mikrostavu, $\beta = 1/(k_B T)$, kde $k_B = 1{,}380\,65 \cdot 10^{-23}$ J K^{-1} je Boltzmannova konstanta (Mikulčák, 2015) a T je termodynamická teplota. Převrácená hodnota normovací konstanty A se nazývá statistický integrál, případně statistická suma a značí se Z.

V případě spojitého systému jde o statistický integrál a rozdělovací funkce má v tomto systému význam hustoty pravděpodobnosti. I když dále budeme počítat jen statistické sumy, protože pouze v diskrétních systémech se uplatňují kombinatorické principy, uvedeme pro úplnost i vztah pro statistický integrál:

$$Z = \int_{f.p.} e^{-\beta E} \mathrm{d}\Phi.$$

Jedná se o integrál přes celý fázový prostor ($f.p.$, „integrál přes všechny mikrostavy“).

V případě diskrétního systému se ze statistického integrálu stává statistická suma a má tvar:

$$Z = \frac{1}{A} = \sum_{j=1}^{\substack{počet \\ mikrostavů}} e^{-\beta E_j}, \tag{5.1}$$

kde sčítáme přes všechny možné mikrostavy systému. E_j je energie daného mikrostavu. V diskrétním systému má rozdělovací funkce význam pravděpodobnosti, že systém je v daném mikrostavu.

Pro systém N stejných neinteragující částic lze statistickou sumu psát ve tvaru:

$$Z = Z_1^N = \left(\sum_{j=1}^{\substack{počet \\ mikrostavů}} e^{-\beta E_j} \right)^N, \tag{5.2}$$

kde Z_1 je statistická suma systému, který obsahuje právě jednu částici. Jedná se tedy o N-tou mocninu statistické sumy pro právě jednu částici, kde N je počet částic. To, že tento vztah dává stejný výsledek, jako kdybychom počítali statistickou sumu podle vztahu (5.1), si ukážeme v úloze 5.1 a dalších. Tento vztah platí i pro statistický integrál.

Úloha 5.1: Mějme systém, který má jedinou povolenou energii, ale přísluší ji 6 různých stavů, je tedy šestkrát degenerovaná. Určete statistickou sumu Z v případě, že se v systému nachází a) jediná částice a b) dvě rozlišitelné neinteragující částice.

Řešení:

a) Při řešení vyjdeme ze vztahu (5.1) pro statistickou sumu. Počet mikrostavů pro jednu částici je 6, protože máme 6 různých stavů. Energie každého stavu se rovnají $E_1 = E_2 = E_3 = E_4 = E_5 = E_6 = E$. Dostáváme:

$$Z_1 = \sum_{j=1}^{6} e^{-\beta E_j} = e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_4} + e^{-\beta E_5} + e^{-\beta E_6} =$$
$$= 6e^{-\beta E}.$$

Vzhledem k tomu, že potenciální energii známe vždy až na aditivní konstantu, tak si lze bez újmy na obecnosti položit $E = 0$ a dostáváme:

$$Z_1 = 6e^{-\beta \cdot 0} = 6.$$

b) V případě 2 rozlišitelných částic, můžeme postupovat dvěma způsoby. Buď vyjdeme ze vztahu (5.1) pro statistickou sumu anebo využijeme toho, že máme vypočtenou statistickou sumu pro jedinou částici, kterou poté umocníme na počet částic, podle vztahu (5.2).

Pokud vyjdeme ze vztahu (5.1) pro statistickou sumu je potřeba určit počet mikrostavů. Jelikož máme 2 částice a 6 různých stavů, tak obě částice se mohou nacházet v jednom ze 6 stavů. První i druhá částice má tedy na výběr ze 6 stavů a počet mikrostavů je $6 \cdot 6 = 36$. Všechny tyto mikrostavy mají celkovou energii rovnou $2E$. Statistická suma má tvar:

$$Z = \sum_{j=1}^{36} e^{-\beta E_j} = 36e^{-\beta \cdot 2E}.$$

Stejně jako výše bez újmy na obecnosti položíme $E = 0$ a dostáváme:

$$Z = 36e^{-\beta \cdot 0} = 36.$$

Při řešení pomocí jedné částice vyjdeme z řešení části a) a vztahu (5.2). Dostáváme:

$$Z = (Z_1)^N = \left(6e^{-\beta E}\right)^2 = 36e^{-\beta \cdot 2E} = 36e^{-\beta \cdot 2 \cdot 0} = 36.$$

Jak můžeme vidět, oba způsoby řešení dávají stejný výsledek.

Úloha 5.2: Mějme systém, který má jedinou povolenou energii, ale přísluší ji 6 různých stavů, je tedy šestkrát degenerovaná. Energii těchto přípustných stavů položíme rovnou nule. Určete statistickou sumu Z v případě, že se v systému nachází:

a) 4 rozlišitelné částice,
b) 4 fermiony,
c) 4 bosony.

Řešení: Ve všech případech je energie každého mikrostavu rovna nule, proto ve vztahu pro statistickou sumu bude exponenciála rovna jedné. Statistická suma se tedy bude rovnat počtu mikrostavů.

a) Pro 4 rozlišitelné částice budeme tuto úlohu řešit nejprve podle vztahu (5.2), tj. spočteme statistickou sumu pro jednu částici, a poté ji umocníme na počet částic. Nejprve určíme počet mikrostavů pro 1 částici, v tomto případě částice může být v jednom ze 6 různých stavů, má tedy 6 možností. Statistická suma pro jedinou částici má tvar:

$$Z_1 = \sum_{j=1}^{6} e^{-\beta E_j} = 6e^{-\beta \cdot 0} = 6.$$

Statistická suma pro 4 rozlišitelné částice má tvar:

$$Z = (Z_1)^N = (6)^4 = 1\,296.$$

Pokud vyjdeme ze vztahu (5.1) pro statistickou sumu je potřeba určit počet mikrostavů. Máme 4 částice a 6 různých stavů, všechny 4 částice se mohou nacházet v jednom ze 6 stavů, počet mikrostavů je $6 \cdot 6 \cdot 6 \cdot 6 = 6^4 = 1\,296$, jedná se o variace s opakováním (vztah (1.4)). Statistická suma má tvar:

$$Z = \sum_{j=1}^{1\,296} e^{-\beta E_j} = 1\,296 e^{-\beta \cdot 0} = 1\,296.$$

Jak lze vidět, oba způsoby řešení dávají stejný výsledek.

b) V případě fermionů určíme počet mikrostavů tak, že vybereme 4 stavy ze 6, kam umístíme 4 fermiony, protože žádné dva fermiony nemohou být ve stejném stavu. Podle vztahu (1.3) pro kombinace dostáváme:

$$\binom{6}{4} = \frac{6!}{4! \cdot 2!} = \frac{5 \cdot 6}{2} = 15.$$

Tedy statistická suma má tvar:

$$Z = \sum_{j=1}^{15} e^{-\beta E_j} = 15 e^{-\beta \cdot 0} = 15.$$

c) V případě bosonů počet mikrostavů určíme tak, že máme 4 nerozlišitelné částice („kolečka“) rozdělit do 6 přihrádek, tedy podle vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním dostaneme:

$$\binom{4+6-1}{4} = \binom{9}{4} = \frac{9!}{4! \cdot 5!} = \frac{6 \cdot 7 \cdot 8 \cdot 9}{2 \cdot 3 \cdot 4} = 126.$$

Statistická suma má tedy tvar:

$$Z = \sum_{j=1}^{126} e^{-\beta E_j} = 126 e^{-\beta \cdot 0} = 126.$$

Povšimněme si, že v případě fermionů a bosonů nemůžeme použít vztah (5.2), protože se jedná o nerozlišitelné částice, tedy nezáleží nám na uspořádání a vztah (5.2) zahrnuje všechna uspořádání částic.

Úloha 5.3: Mějme systém, který má jedinou povolenou energii, ale přísluší ji 3 různé stavy, je tedy třikrát degenerovaná. Energie těchto přípustných stavů je rovna ε. Určete statistickou sumu Z v případě, že se v systému nachází:

a) 2 rozlišitelné částice,
b) 2 fermiony,
c) 2 bosony.

Řešení: V tomto případě již není energie každého mikrostavu rovna nule jako v předchozí úloze, a proto nebude exponenciální funkce rovna jedné. Všechny mikrostavy ale mají stejnou energii, rovnou 2ε.

a) V případě rozlišitelných částic nejprve určíme statistickou sumu pro jedinou částici, a poté ji umocníme na počet částic podle vztahu (5.2), protože máme

3 různé stavy, tak počet mikrostavů jedné částice je také roven 3. Energie přípustných stavů $E_1 = E_2 = E_3 = \varepsilon$ a statistická suma pro jednu částici má tvar:

$$Z_1 = \sum_{j=1}^{3} e^{-\beta E_j} = 3e^{-\beta\varepsilon}.$$

Statistická suma pro 2 rozlišitelné částice má tvar:

$$Z = (Z_1)^N = \left(3e^{-\beta\varepsilon}\right)^2 = 9e^{-2\beta\varepsilon}.$$

Pokud vyjdeme ze vztahu (5.1) pro statistickou sumu je potřeba určit počet mikrostavů. Máme 2 částice a 3 různé stavy, obě částice se mohou nacházet v jednom ze 3 stavů a počet mikrostavů je tedy $3 \cdot 3 = 3^2 = 9$. Energie každého mikrostavu je 2ε a statistická suma má tvar:

$$Z = \sum_{j=1}^{9} e^{-\beta E_j} = 9e^{\,-\beta\cdot 2\varepsilon} = 9e^{-2\beta\varepsilon}.$$

Jak lze vidět opět jsme oběma způsoby řešení dostali stejný výsledek.

b) V případě fermionů počet mikrostavů odpovídá počtu způsobů, kterými můžeme obsadit 3 různé stavy dvěma fermiony, tedy vybíráme 2 stavy ze 3. Pomocí vztahu (1.3) pro kombinace dostáváme:

$$\binom{3}{2} = 3.$$

Protože energie každého mikrostavu je 2ε (obě částice jsou ve stavu s energií ε). Statistickou sumu pro 2 fermiony dostáváme ve tvaru:

$$Z = \sum_{j=1}^{3} e^{-\beta E_j} = e^{-\beta\cdot 2\varepsilon} + e^{-\beta\cdot 2\varepsilon} + e^{-\beta\cdot 2\varepsilon} = 3e^{-2\beta\varepsilon}.$$

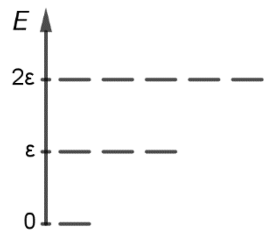
c) V případě bosonů určíme počet všech mikrostavů. Chceme určit kolika způsoby mohou 2 nerozlišitelné částice obsadit 3 různé stavy. Jedná se o úlohu typu „kolečka a přihrádky“, jde tedy o vztah (1.6) pro kombinace s opakováním. Dostáváme:

$$\binom{2+3-1}{2} = \binom{4}{2} = \frac{4!}{2! \cdot 2!} = \frac{3 \cdot 4}{2} = 6.$$

Energie každého mikrostavu je také 2ε, neboť obě částice jsou ve stavu s energií ε. Statistická suma má tvar:

$$Z = \sum_{j=1}^{6} e^{-\beta E_j} = 6e^{-2\beta\varepsilon}.$$

Úloha 5.4: Mějme systém s jednou částicí a se třemi kvantovými stavy s energiemi $0, \varepsilon, 2\varepsilon$. Stav s energií $E = 0$ je nedegenerovaný, stav s energií $E = \varepsilon$ je třikrát degenerovaný a stav s energií $E = 2\varepsilon$ je pětkrát degenerovaný. Systém těchto energetických hladin je znázorněn na obrázku 5.1. Určete statistickou sumu Z pro tento systém.

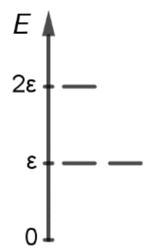


Obrázek 5.1: Systém energetických hladin v úloze 5.4

Řešení: Částice má celkem 9 stavů, ve kterých se může nacházet. Jediný stav má energii $E = 0$. Energii $E = \varepsilon$ mají 3 stavy, protože energie je třikrát degenerovaná. Energií $E = 2\varepsilon$ má 5 stavů, protože energie je pětkrát degenerovaná. Tedy statistická suma má tvar:

$$Z = e^{-\beta \cdot 0} + 3e^{-\beta \cdot \varepsilon} + 5e^{-\beta \cdot 2\varepsilon} = 1 + 3e^{-\beta\varepsilon} + 5e^{-2\beta\varepsilon}.$$

Úloha 5.5: Mějme systém se dvěma rozlišitelnými částicemi a se dvěma kvantovými stavy s energiemi ε a 2ε. Stav s energií $E = \varepsilon$ je dvakrát degenerovaný a stav s energií $E = 2\varepsilon$ je nedegenerovaný. Systém těchto energetických hladin je znázorněn na obrázku 5.2. Určete statistickou sumu Z pro tento systém.



Obrázek 5.2: Systém energetických hladin v úloze 5.5

Řešení: Máme 2 částice a 3 různé stavy, obě částice se mohou nacházet v jednom ze tří stavů. Počet mikrostavů je tedy $3 \cdot 3 = 3^2 = 9$. Z tabulky 5.1 lze vidět, že makrostav s energií $E = 2\varepsilon$ lze realizovat 4 způsoby, makrostav s energií $E = 3\varepsilon$ lze také realizovat 4 způsoby a makrostav s energií $E = 4\varepsilon$ lze realizovat 1 způsobem. Statistická suma má tedy tvar:

$$Z = 4e^{-2\beta\varepsilon} + 4e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}.$$

Tabulka 5.1: V tabulce jsou uvedeny ve sloupcích jednotlivé mikrostavy, druhý až čtvrtý řádek znázorňuje obsazení jednotlivých stavů, jedna částice je znázorněna prázdným a druhá plným kolečkem. V posledním řádku je hodnota celkové energie jednotlivých mikrostavů. Stejnou barvou jsou označeny mikrostavy se stejnou energií, barvy tedy určují jednotlivé makrostavy.

	jednotlivé mikrostavy								
	A	B	C	D	E	F	G	H	I
ε	○●	○	○	●	●				
ε		●		○		○●	○	●	
2ε			●		○		●	○	○●
E_X	2ε	2ε	3ε	2ε	3ε	2ε	3ε	3ε	4ε

Poznámka: Na základě řešení úlohy 5.5 (zejména tabulky 5.1) určíme tvar statistické sumy i pro 2 fermiony a 2 bosony. V případě 2 fermionů nemohou nastat mikrostavy A, F a I, protože 2 fermiony nemohou být ve stejném stavu a mikrostavy B a D jsou shodné, protože fermiony jsou nerozlišitelné částice, stejně tak mikrostavy C a E jsou shodné, a i mikrostavy G a H jsou shodné. Dva fermiony tedy mohou být jen ve 3 mikrostavech. Statistická suma má tedy tvar:

$$Z = 1e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon}.$$

V případě 2 bosonů se nám shodují stejné mikrostavy jako u fermionů, neboť i bosony jsou nerozlišitelné částice. Mikrostavy A, F, I v případě 2 bosonů nastat mohou, protože 2 bosony mohou být ve stejném stavu. Celkem tedy máme 6 mikrostavů. Statistická suma má tvar:

$$Z = 3e^{-2\beta\varepsilon} + 2e^{-3\beta\varepsilon} + e^{-4\beta\varepsilon}.$$

Grandkanonická statistická suma

V této podkapitole si nejprve připomeneme, co je to grandkanonický soubor, jaký tvar má grandkanonická rozdělovací funkce a grandkanonická statistická suma. A poté již budeme řešit úlohy týkající se grandkanonické statistické sumy.

Grandkanonický soubor popisuje systém, který si může se svým okolím vyměňovat nejenom energii, ale také částice. Definici jsme převzali ze skript (Koupilová, n. d.).

Grandkanonická rozdělovací funkce je funkcí dvou proměnných: energie E a počtu částic N v daném mikrostavu a má tvar:

$$\rho(E, N) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-BE+CN},$$

kde B a C jsou konstanty a $\mathcal{Z}$ je normovací konstanta. Konstanta B má stejný význam i hodnotu jako konstanta β, tj. $B = \beta = 1/(k_B\, T)$. Konstanta C má tvar $C = \mu/(k_B\, T)$, kde μ je tzv. chemický potenciál, který má rozměr energie. Normovací konstanta $\mathcal{Z}$ se nazývá grandkanonický statistický integrál, resp. grandkanonická statistická suma podle toho, jestli ji počítáme pro spojitý, resp. diskrétní systém. Gradkanonická statistická suma, která se také někdy nazývá velká statistická suma, má tvar:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{N_{max}} \sum_{i_N} e^{\frac{-E_{i_N}+\mu_i N}{k_B T}}, \tag{5.3}$$

kde index i_N čísluje mikrostavy, ve kterých má systém právě N částic, E_{i_N} je energie konkrétního mikrostavu systému s N částicemi. Grandkanonickou sumu dostaneme tak, že sečteme kanonické sumy pro všechny přípustné počty částic v systému. Pokud mají všechny částice v daném mikrostavu stejnou energii lze psát $E_{i_N} = N \cdot E_i$. Pokud mají všechny částice stejnou hodnotu chemického potenciálu lze psát $\mu_{i_N} = N \cdot \mu_i$.

Úloha 5.6: Kvantový systém obsahuje tři různé stavy se stejnou energií. Všechny stavy mají energii nulovou, a i chemický potenciál uvažujme nulový. Určete grandkanonickou statistickou sumu $\mathcal{Z}$ v případě, že systém může obsahovat:

a) maximálně 4 rozlišitelné částice,
b) maximálně 4 identické bosony,
c) maximálně 4 identické fermiony.

Řešení: Ve všech případech mají všechny mikrostavy nulovou energii a nulový chemický potenciál, a proto bude argument všech exponenciál nulový a exponenciály tedy budou rovny jedné.

a) Nejprve určíme počty mikrostavů pro jednotlivé počty částic. Jelikož se jedná o rozlišitelné částice počet mikrostavů se určí pomocí vztahu (1.4) pro variace s opakováním, kdy každá částice má na výběr ze 3 různých stavů. Počty mikrostavů pro přehlednost uvedeme do tabulky 5.2.

Tabulka 5.2: Počty mikrostavů pro různé počty rozlišitelných částic v úloze 5.6.

počet částic	počet mikrostavů
0	$3^0 = 1$
1	$3^1 = 3$
2	$3^2 = 9$
3	$3^3 = 27$
4	$3^4 = 81$

Určili jsme jednotlivé počty mikrostavů a teď již vyjádříme grandkanonickou statistickou sumu. Jednotlivé sumy odpovídají jednotlivým možnostem počtu částic. Dostáváme:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{4} \sum_{i_N} e^{\frac{-NE_i + N\mu}{k_B T}} = \sum_{i_0=1}^{1} e^{\frac{-0\cdot 0+0\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_1=1}^{3} e^{\frac{-1\cdot 0+1\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_2=1}^{9} e^{\frac{-2\cdot 0+2\cdot 0}{k_B T}} +$$
$$+ \sum_{i_3=1}^{27} e^{\frac{-3\cdot 0+3\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_4=1}^{81} e^{\frac{-4\cdot 0+4\cdot 0}{k_B T}} = 1 + 3 + 9 + 27 + 81 =$$
$$= 121.$$

b) Nejprve určíme počty mikrostavů pro jednotlivé počty bosonů. Jelikož se jedná o bosony počet mikrostavů se určí pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním. Počty mikrostavů se určují stejným způsobem jako v úloze 5.2, akorát v této úloze uvažujeme postupně různé počty částic, máme 0, 1, 2, 3 až 4 bosony. Počty mikrostavů pro přehlednost uvedeme do tabulky 5.3.

Tabulka 5.3: Počty mikrostavů pro různé počty bosonů v úloze 5.6.

počet bosonů	počet mikrostavů
0	$\binom{0+3-1}{0} = \binom{2}{0} = 1$
1	$\binom{1+3-1}{1} = \binom{3}{1} = 3$
2	$\binom{2+3-1}{2} = \binom{4}{2} = 6$
3	$\binom{3+3-1}{3} = \binom{5}{3} = 10$
4	$\binom{4+3-1}{4} = \binom{6}{4} = 15$

Grandkanonická statistická suma má tvar:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{4} \sum_{i_N} e^{\frac{-NE_i+N\mu}{k_B T}} = \sum_{i_0=1}^{1} e^{\frac{-0\cdot 0+0\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_1=1}^{3} e^{\frac{-1\cdot 0+1\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_2=1}^{6} e^{\frac{-2\cdot 0+2\cdot 0}{k_B T}} +$$

$$+ \sum_{i_3=1}^{10} e^{\frac{-3\cdot 0+3\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_4=1}^{15} e^{\frac{-4\cdot 0+4\cdot 0}{k_B T}} = 1 + 3 + 6 + 10 + 15 = 35.$$

c) Nejprve určíme počty mikrostavů pro jednotlivé počty fermionů. Jelikož se jedná o fermiony počet mikrostavů se určí pomocí vztahu (1.3) pro kombinace. Počty mikrostavů se určují stejně jako v úloze 5.2, akorát postupně uvažujeme 0 až 4 fermiony. Počty mikrostavů pro přehlednost uvedeme do tabulky 5.4.

Pro 4 fermiony nemáme žádnou možnost, jak by mohly obsadit 3 různé stavy, protože by to znamenalo, že by nějaké 2 fermiony musely být ve stejném stavu a to nelze.

Tabulka 5.4: Počty mikrostavů pro různé počty fermionů v úloze 5.6.

počet fermionů	počet mikrostavů
0	$\binom{3}{0} = 1$
1	$\binom{3}{1} = 3$
2	$\binom{3}{2} = 3$
3	$\binom{3}{3} = 1$
4	nelze

Grandkanonická statistická suma má tvar:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{3} \sum_{i_N} e^{\frac{-NE_i+N\mu}{k_B T}} = \sum_{i_0=1}^{1} e^{\frac{-0\cdot 0+0\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_1=1}^{3} e^{\frac{-1\cdot 0+1\cdot 0}{k_B T}} + \sum_{i_2=1}^{3} e^{\frac{-2\cdot 0+2\cdot 0}{k_B T}} +$$

$$+ \sum_{i_3=1}^{1} e^{\frac{-3\cdot 0+3\cdot 0}{k_B T}} = 1 + 3 + 3 + 1 = 8.$$

Úloha 5.7: Kvantový systém obsahuje pět různých stavů se stejnou energií. Energie má ve všech stavech hodnotu $\varepsilon \neq 0$ a chemický potenciál μ je také nenulový a konstantní. Určete grandkanonickou statistickou sumu $\mathcal{Z}$ v případě, že systém může obsahovat:

a) maximálně 3 rozlišitelné částice,
b) maximálně 3 identické bosony,
c) maximálně 3 identické fermiony.

Řešení:

a) Nejprve určíme počty mikrostavů pro jednotlivé počty rozlišitelných částic, pomocí vztahu (1.4) pro variace s opakováním, kdy každá částice má na výběr z 5 různých stavů. Počty mikrostavů pro přehlednost uvedeme do tabulky 5.5.

Tabulka 5.5: Počty mikrostavů pro jednotlivé počty rozlišitelných částic v úloze 5.7.

počet částic	počet mikrostavů
0	$5^0 = 1$
1	$5^1 = 5$
2	$5^2 = 25$
3	$5^3 = 125$

Dosadíme do vztahu (5.3) pro grandkanonickou statistickou sumu a dostáváme:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{3} \sum_{i_N} e^{\frac{-NE_i+N\mu}{k_BT}} = \sum_{i_0=1}^{1} e^{\frac{-0\varepsilon+0\mu}{k_BT}} + \sum_{i_1=1}^{5} e^{\frac{-1\varepsilon+1\mu}{k_BT}} + \sum_{i_2=1}^{25} e^{\frac{-2\varepsilon+2\mu}{k_BT}} +$$

$$+ \sum_{i_3=1}^{125} e^{\frac{-3\varepsilon+3\mu}{k_BT}} = 1 + 5e^{\frac{-\varepsilon+\mu}{k_BT}} + 25e^{\frac{-2\varepsilon+2\mu}{k_BT}} + 125e^{\frac{-3\varepsilon+3\mu}{k_BT}}.$$

b) Počty mikrostavů pro jednotlivé počty bosonů určíme pomocí vztahu (1.6) pro kombinace s opakováním. Počty mikrostavů pro přehlednost uvedeme do tabulky 5.6.

Tabulka 5.6: Počty mikrostavů pro jednotlivé počty bosonů v úloze 5.7.

počet bosonů	počet mikrostavů
0	$\binom{0+5-1}{0} = \binom{4}{0} = 1$
1	$\binom{1+5-1}{1} = \binom{5}{1} = 5$
2	$\binom{2+5-1}{2} = \binom{6}{2} = 15$
3	$\binom{3+5-1}{3} = \binom{7}{3} = 35$

Ze vztahu (5.3) pro grandkanonickou statistickou sumu dostáváme:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{3} \sum_{i_N} e^{\frac{-NE_i+N\mu}{k_BT}} = \sum_{i_0=1}^{1} e^{\frac{-0\varepsilon+0\mu}{k_BT}} + \sum_{i_1=1}^{5} e^{\frac{-1\varepsilon+1\mu}{k_BT}} + \sum_{i_2=1}^{15} e^{\frac{-2\varepsilon+2\mu}{k_BT}} +$$

$$+ \sum_{i_3=1}^{35} e^{\frac{-3\varepsilon+3\mu}{k_BT}} = 1 + 5e^{\frac{-\varepsilon+\mu}{k_BT}} + 15e^{\frac{-2\varepsilon+2\mu}{k_BT}} + 35e^{\frac{-3\varepsilon+3\mu}{k_BT}}.$$

c) Počty mikrostavů pro jednotlivé počty fermionů určíme pomocí vztahu (1.3) pro kombinace. Počty mikrostavů pro přehlednost uvedeme do tabulky 5.7.

Tabulka 5.7: Počty mikrostavů pro jednotlivé počty fermionů v úloze 5.7.

počet fermionů	počet mikrostavů
0	$\binom{5}{0} = 1$
1	$\binom{5}{1} = 5$
2	$\binom{5}{2} = 10$
3	$\binom{5}{3} = 10$

Dosadíme do vztahu (5.3) pro grandkanonickou statistickou sumu a dostáváme:

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{3} \sum_{i_N} e^{\frac{-NE_i+N\mu}{k_BT}} = \sum_{i_0=1}^{1} e^{\frac{-0\varepsilon+0\mu}{k_BT}} + \sum_{i_1=1}^{5} e^{\frac{-1\varepsilon+1\mu}{k_BT}} + \sum_{i_2=1}^{10} e^{\frac{-2\varepsilon+2\mu}{k_BT}} +$$

$$+ \sum_{i_3=1}^{10} e^{\frac{-3\varepsilon+3\mu}{k_BT}} = 1 + 5e^{\frac{-\varepsilon+\mu}{k_BT}} + 10e^{\frac{-2\varepsilon+2\mu}{k_BT}} + 10e^{\frac{-3\varepsilon+3\mu}{k_BT}}.$$

Všimněme si, že ve všech úlohách jsme uvažovali i člen grandkanonické statistické sumy $\mathcal{Z}$, ve kterém bylo $N = 0$, tj. uvažovali jsme i možnost, že v systému není žádná částice, a tento člen byl vždy roven 1.

Závěr

Cílem této bakalářské práce bylo vytvořit studijní text, který by pomohl čtenářům aplikovat jejich znalosti z kombinatoriky ve fyzikálních úlohách. Tento cíl byl v bakalářské práci naplněn, neboť vznikl text, který obsahuje vysvětlení základních vztahů a pojmů a řešené úlohy, ve kterých tyto vztahy a pojmy čtenář aplikuje. V prvních dvou kapitolách se jednalo o čistě matematické úlohy, ve kterých si čtenář zopakoval kombinatorické znalosti, a až poté tyto své znalosti aplikoval ve fyzikálních úlohách.

Za klíčovou považujeme druhou kapitolu Přípravné úlohy, která pomáhá překonat bariéru mezi čistě matematickými a fyzikálními úlohami. Domníváme se, že tato kapitola může pomoci čtenáři tento přechod lépe zvládnout, neboť se čtenář při řešení fyzikální úlohy může podívat do této kapitoly a ujasnit si, jak se řešila analogická úloha s běžnými objekty (rostlinkami, květináči atd.) a teprve poté si ji „přeložit“ do řeči částic a energetických stavů.

Já samotná jsem si při psaní této bakalářské práce ujasnila spoustu fyzikálních pojmů, které mi byly, jak jsem již psala v úvodu práce nejasné a hodně mi k tomu dopomohly zmíněné úlohy z kapitoly Přípravné úlohy.

Práce by v budoucnu mohla být ještě rozšířena o kapitolu týkající se entropie a o úlohy řešené pomocí Stirlingova vzorce.

Seznam použité literatury

Bečvář, Jindřich. 2005. *Lineární algebra. Vyd.3.* Praha : Matfyzpress, 2005. stránky 52, 164. ISBN 80-86732-57-6.

Beiser, Arthur. 1978. *Úvod do moderní fyziky: vysokoškolská učebnice.* Praha : Academia, 1978. stránky 240-243.

Calda, Emil a Dupač, Václav. 2008. *Matematika pro gymnázia. 5. vydání.* Učebnice pro střední školy. Praha : Prometheus, 2008. stránky 8-55. ISBN 978-80-7196-365-3.

Calda, Emil. 1996. *Kombinatorika pro učitelské studium.* Praha : Matfyzpress, 1996. stránky 2-10. ISBN 80-85863-13-8.

Koupilová, Zdeňka a Kácovský, Petr. (n. d). Statistická fyzika a kousky termodynamiky - pro budoucí učitele s otázkami, úkoly a úlohami. *Katedra didaktiky fyziky.* [Online] (n. d). [Citace: 8. červenec 2022.] Kapitola 4,str. 47. https://kdf.mff.cuni.cz/vyuka/TaSF/.

Koupilová, Zdeňka. n. d.. Interní materiály k výuce statistické fyziky. *Grandkanonický soubor.* n. d. str. 133.

Loverude, Michael. 2009. Student understanding of basic probability concepts in an upper-division thermal physics course. Ann Arbor, Michigan : Part of the PER Conference series, 11. 11 2009. stránky 189-192.

Mikulčák, Jiří. 2015. *Matematické, fyzikální a chemické tabulky a vzorce pro střední školy.* Praha : Prometheus, 2015. str. 154. ISBN 978-80-7196-264-9.

Oliver, Kristin a Wilcox, Bethany. 2021. Understanding combinatorics challenges in an upper-division thermodynamics course. Virtual Conference : Part of the PER Conference series, 1. 10 2021. stránky 315-320.

Seznam tabulek

Seznam obrázků