MECANICA CUANTICA 2

LECTURA #17

PARTICULAS INDISTINGUIBLES

Las particulas subatomicas de un mismo tipo son identicas. Todos los electrones son identicos, por ejemplo.

¿Pueden dos particulas identicas estar en un mismo estado?

Si las particulas que conforman un sistema son identicas, en la descripción teorica de ese sistema al intercambiar dos de ellas esto no deberia afectar ningun resultado.

En mecanica clasica tambien consideramos el caso de particulas identicas. En este caso, si por ejemplo tenemos dos particulas identicas 1 y 2, siempre vamos a poder determinar posición y momentum para las dos particulas en un instante dado de tiempo, y así poder seguir sus trayectorias en el tiempo y el espacio, portanto, en principio podemos identificar cualquiera de ellas en cualquier momento. En mecanica clasica las particulas identicas son distinguibles.

En mecanica cuantica el concepto de trayectoria de una particula no esta presente, por tanto no podemos hacerle un seguimiento a las particulas 1 y 2. Podemos medir con cierta presición limitada por el principio de incertidumbre, la posición y el momentum de las particulas 1 y 2. A partir de esa medición no podemos hacer un seguimiento de sus trayectorias, solo podemos saber en que medida los paquetes de onda asociados a las dos particulas se dispersan. Si los dos paquetes de onda se sobrelapan, ya no podremos saber si una subsecuente medición corresponde a la particula 1 o a la particula 2. De hecho la pregunta pasa a carecer de sentido

En mecanica cuantica tenemos circunstancias en las cuales las particulas no solo son identicas, sino que tambien son indistinguibles.

Supongamos que tenemos dos particulas identicas 1 y 2, y un hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}_1^2 + \frac{\hat{P}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}_2^2 = \hat{h}^{(1)} + \hat{h}^{(2)} \qquad \hat{h} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 \leftarrow \text{Oscilador armonico}$$

$\{|n\rangle\} \leftarrow$ Estados propios de $\hat{h}$

$\hookrightarrow E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

Para el sistema compuesto, el estado base es $|\Phi_0\rangle = |0\rangle|0\rangle \quad \longleftarrow E_0 = 2 \cdot \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega$

El primer estado excitado corresponde a $E_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega = 2\hbar\omega$

$|\Phi_1\rangle = \lambda|1\rangle|0\rangle + \mu|0\rangle|1\rangle \qquad |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \longleftarrow$ numero infinito de posibilidades !

$|\Phi_1\rangle$ es ambiguo a este nivel. El problema ésta en que cada una de estas posibilidades para $|\Phi_1\rangle$ nos aportará resultados diferentes para observables físicos.

Ej: observable $\hat{X}_1 \otimes \hat{X}_2$

$$\langle x_1 x_2\rangle_{\Phi_1} = \langle\Phi_1|\hat{X}_1\otimes\hat{X}_2|\Phi_1\rangle = \{\lambda^*\langle 1|\langle 0| + \mu^*\langle 0|\langle 1|\}(\hat{X}_1\otimes\hat{X}_2)\{\lambda|1\rangle|0\rangle + \mu|0\rangle|1\rangle\}$$

$$= |\lambda|^2\langle 1|\hat{X}_1|1\rangle\langle 0|\hat{X}_2|0\rangle + \lambda^*\mu\langle 1|\hat{X}_1|0\rangle\langle 0|\hat{X}_2|1\rangle + \lambda\mu^*\langle 0|\hat{X}_1|1\rangle\langle 1|\hat{X}_2|0\rangle + |\mu|^2\langle 0|\hat{X}_1|0\rangle\langle 1|\hat{X}_2|1\rangle$$

$\hat{X}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle + \sqrt{n}\,|n-1\rangle\right\}$

$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}+\hat{a}^{+}) \qquad \hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{x}$

$\hat{X}|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,|1\rangle$

$\hat{X}|1\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{2}\,|2\rangle + |0\rangle\right\}$

$\Rightarrow$

$\langle 0|\hat{X}|0\rangle = 0$

$\langle 1|\hat{X}|1\rangle = 0$

$\langle 1|\hat{X}|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

$\langle 0|\hat{X}|1\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

$\Rightarrow \langle x_1 x_2\rangle_{\phi_1} = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{\lambda^*\mu + \lambda\mu^*\right\} = \frac{\hbar}{m\omega}\,\mathrm{Re}\left\{\lambda^*\mu\right\}$

$\Rightarrow \langle x_1 x_2\rangle_{\phi_1}$ depende de λ y μ, pero no hemos definido λ y μ. Solo conocemos $E_2 = 2\hbar\omega$

Tenemos un problema en la teoría que hay que arreglar.

Tenemos dos posibilidades : $\lambda = \pm\mu \qquad |\lambda| = |\mu| = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\left.\begin{aligned} |\Phi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle\right\} \\ |\Phi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle\right\} \end{aligned}\right\} \text{Dos posibilidades.}$$

¿Cual de los posibilidades hay que usar? eso depende de la naturaleza de las partículas, depende de su spin!

El Operador de Intercambio

Concideremos un espacio de Hilbert $\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)}$

$\{|k\rangle\} \rightarrow$ base de $\mathcal{E}^{(1)}$; $\{|n\rangle\} \rightarrow$ base de $\mathcal{E}^{(2)}$

$|\psi\rangle \in \mathcal{E} \Rightarrow |\psi\rangle = \sum_{k,n} c_{kn}|k\rangle|n\rangle = \sum_{kn} |1:k\,;2:n\rangle$ ← Este indexamiento no posee ningun significado si los particulos son identicos.

Los predicciones físicas deben ser independientes del indexamiento de los particulos.

Introducimos el operador de intercambio $\hat{P}_{12}$

$\hat{P}_{12}|1:k\,;2:n\rangle = |1:n\,;2:k\rangle \longrightarrow \hat{P}_{12}^2 = \hat{\mathbb{1}}$

Ej: Sistema de dos particulas con grados de libertad externos

$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \longrightarrow \hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$

Ej: dos particulas de spin 1/2

$\{|+;+\rangle, |+;-\rangle, |-;+\rangle, |-;-\rangle\}$ ← base desacoplada

$|J=1, M=1\rangle = |+;+\rangle$

$|J=1, M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|+;-\rangle + |-;+\rangle\}$

$|J=1, M=-1\rangle = |-;-\rangle$

$|J=0, M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|+;-\rangle - |-;+\rangle\}$

$\hat{P}_{12}|J=1, M\rangle = |J=1, M\rangle$ ← Simetrico

$\hat{P}_{12}|J=0, M=0\rangle = -|J=0, M=0\rangle$ ← Antisimetrico

La idea es que $|\psi\rangle$ y $\hat{P}_{12}|\psi\rangle$ deben predecir los mismos resultados písicos => solo pueden diferir en un factor de fase $e^{i\delta}$

$\hat{P}_{12}|\psi\rangle = e^{i\delta}|\psi\rangle$; $\hat{P}_{12}^2|\psi\rangle = e^{i2\delta}|\psi\rangle$ => $e^{i2\delta} = 1$ => $\delta = 0, \pi$ => $\hat{P}_{12}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$

$\hat{P}_{12}|\psi\rangle = +|\psi\rangle$ ← Simetrico

$\hat{P}_{12}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$ ← Antisimetrico

Para que la indistinguibilidad de particulas identicas no afecte los resultados písicos, los unicas opciones para la función de onda de un estado compuesto son funciones de onda simetricas o antisimetricas ante el intercambio de particulas.

Principio de Pauli

Todas las particulas de la naturaleza pertenecen a una de las siguientes categorias:

Bosones: Para los cuales el estado de dos particulas identicas es siempre simetrico ante intercambio

Fermiones: Para las cuales el estado de dos particulas identicas es siempre antisimetrico ante intercambio.

Las particulas de spin entero son bosones
Las particulas de spin semientero son fermiones.

Este resultado se puede obtener en el proceso de cuantización de campos, pero la demostración no es muy iluminante. Este "Teorema de spin-estadistica" continua siendo algo que amerita un entendimiento más profundo.

En un sistema de dos fermiones identicos la funsión de onda es antisimetrica

$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle - |\phi_2\rangle|\phi_1\rangle\}$

$|\phi_1\rangle : \{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots\}$; $|\phi_2\rangle : \{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots\}$

Si las dos particulas estubieran en el mismo estado, por ejemplo $|1\rangle$ => $|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|1\rangle|1\rangle - |1\rangle|1\rangle\}$
$= 0.$

=> $|\Phi\rangle = 0$ ← No sucede!

El principio de exclusión de Pauli es consecuencia del caracter antisimetrico de los funciones de onda de sistemas fermionicos.

Demonos cuenta que en sistemas bosonicos esto si puede suceder.

FUNCION DE ONDA "COMPLETA" DE DOS PARTICULAS DE SPIN 1/2

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{matrix} J=0 \\ J=1 \end{matrix}$$

$$\underbrace{|\psi\rangle}_{\text{Antisimetrica}} = \psi_{0,0}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\underbrace{|J=0,M=0\rangle}_{\text{Antisimetrica}} + \sum_{M=-1}^{1}\psi_{1,M}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\underbrace{|J=1,M\rangle}_{\text{Simetrica}}$$

$$\Rightarrow \psi_{00}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi_{00}(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

$$\psi_{1M}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = -\psi_{1M}(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

N PARTICULAS IDENTICAS

$\hat{P}_{ij}$: operador de intercambio de las particulas i,j

$$\Rightarrow \hat{P}_{ij}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$$

$\hat{P}_{ij}|\psi\rangle = +|\psi\rangle \leftarrow$ Bosones $\rightarrow |\psi\rangle$ completamente simetrizada

$\hat{P}_{ij}|\psi\rangle = -|\psi\rangle \leftarrow$ Fermiones $\rightarrow |\psi\rangle$ completamente antisimetrizada.

Simetrizar o antisimetrizar la función de onda de N particulas $\rightarrow$ veamos:

Ej: $N=3$

$|\psi\rangle \rightarrow \psi(u_1,u_2,u_3)$ u_i : conjunto de todas las variables y/o indices asociados al estado de la particula i.

$$\Psi(u_1,u_2,u_3) \sim \{f(u_1,u_2,u_3) + \underbrace{f(u_2,u_3,u_1)}_{\text{dos permutaciones}} + f(u_3,u_1,u_2)\} \pm \{f(u_1,u_3,u_2) + \underbrace{f(u_2,u_1,u_3)}_{\text{Una permutación}} + f(u_3,u_2,u_1)\}$$

$\pm$:

+ : Simetrizada $\rightarrow$ Bosones

− : Antisimetrizada $\rightarrow$ Fermiones.

Tratemos de encontrar una versión general para N particulas.

Veamos el caso de particulas no interactuantes

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N}\hat{h}^{(i)}$$

$\hat{h}^{(i)} = \hat{h} \leftarrow$ Hamiltoniano generico para una particula.

$\hat{h}^{(i)} \rightarrow$ Actua sobre $\mathcal{E}^{(i)}$

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(1)} \otimes \mathcal{E}^{(2)} \otimes \mathcal{E}^{(3)} \otimes \dots$$

$\hat{h}|n_\lambda\rangle = \varepsilon_\lambda |n_\lambda\rangle$ $\quad \{|n_\lambda\rangle\} \leftarrow$ Estados propios de $\hat{h}$

$\{\varepsilon_\lambda\} \leftarrow$ Valores propios de $\hat{h}$

$E = \sum_\lambda N_\lambda \varepsilon_\lambda$ $\quad$ E: Energía total del sistema

N_λ: numero de particulas en el estado $|n_\lambda\rangle$

$$|\psi\rangle = \prod_{i=1}^{N_1} |n^{(i)}_{\lambda=1}\rangle \prod_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} |n^{(i)}_{\lambda=2}\rangle \prod_{i=N_1+N_2+1}^{N_1+N_2+N_3} |n^{(i)}_{\lambda=3}\rangle \cdots$$

Ahora consideremos todos los posibles permutaciones de los N indices $\rightarrow$ N! permutaciones.

Pi : valor del indice i despues de la permutación

$1 \rightarrow P1$
$2 \rightarrow P2$
$3 \rightarrow P3$
$\vdots$

En una permutación particular $P1 = 8$, $P2 = 4$, $P3 = 18$, ... por ejemplo.

$$\delta_P = \begin{cases} +1 & \text{si la permutación es par} \\ -1 & \text{si la permutación es impar} \end{cases}$$

P: permutación total del sistema de N particulas.

$$|n^{(i)}_\lambda\rangle \rightarrow |n^{(Pi)}_\lambda\rangle$$

$$\hat{P}|\psi\rangle = \prod_{i=1}^{N_1} |n^{(Pi)}_{\lambda=1}\rangle \prod_{i=N_1+1}^{N_1+N_2} |n^{(Pi)}_{\lambda=2}\rangle \prod_{i=N_1+N_2+1}^{N_1+N_2+N_3} |n^{(Pi)}_{\lambda=3}\rangle \cdots$$

$$|\hat{P}|\psi\rangle|^2 = ||\psi\rangle|^2$$

$$\Rightarrow \hat{P}|\psi\rangle = \begin{cases} +|\psi\rangle & \text{si P es par} \\ -|\psi\rangle & \text{si P es impar} \end{cases} \leftarrow \text{Fermiones}$$

$\hat{P}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ para todo P $\leftarrow$ Bosones.

Para construir la función de onda de N particulas debemos incluir todos los permutaciones

$$|\psi\rangle_S \sim \sum_{\{P\}} \hat{P}|\psi\rangle \leftarrow \text{Bosones}$$

$$|\psi\rangle_A \sim \sum_{\{P\}} \delta_P \hat{P}|\psi\rangle \leftarrow \text{Fermiones}$$

Para el caso de un sistema fermionico podemos expresar $|\psi\rangle_A$ en terminos de un determinante

$$|\psi\rangle_A = \begin{vmatrix} |n_{\lambda=1}^{(i=1)}\rangle & |n_{\lambda=1}^{(i=2)}\rangle & \dots & |n_{\lambda=1}^{(i=N)}\rangle \\ |n_{\lambda=2}^{(i=1)}\rangle & |n_{\lambda=2}^{(i=2)}\rangle & \dots & |n_{\lambda=2}^{(i=N)}\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |n_{\lambda=N}^{(i=1)}\rangle & |n_{\lambda=N}^{(i=2)}\rangle & \dots & |n_{\lambda=N}^{(i=N)}\rangle \end{vmatrix} \longleftarrow \text{Determinante de SLATER.} \rightarrow N\times N$$

Cada partícula debe estar en un estado diferente, de lo contrario habría dos columnas iguales y el determinante sería igual a cero $\Rightarrow |\psi\rangle_A = 0 \leftarrow$ Principio de exclusión de Pauli

$N_\lambda = 0, 1 \longleftarrow$ Estadística de Fermi-Dirac

$$|\psi\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\{P\}} \delta_P \hat{P} |\psi\rangle \longleftarrow$$

En el caso de Bosones N_λ puede asumir cualquier valor, sujeto a las restricciones:

$$\sum_\lambda N_\lambda = N \; ; \; \sum_\lambda N_\lambda \varepsilon_\lambda = E$$

$$|\psi\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \cdots}} \sum_{\{P\}} \hat{P} |\psi\rangle \longleftarrow \text{Estadística de Bose-Einstein.}$$

La diferencia entre las dos estadísticas tiene consecuencias termodinámicas enormes!