Mecánica Cuántica

Pozo de potencial para sistemas bosonicos y fermionicos.

Ricardo Escobar, Miguel Avila, Gerson Figueroa.
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas USAC.

Pozo de potencial infinito en 1D

Un caso especial del problema a resolver es el pozo de potencial infinito, dado por

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & x > a \end{cases}$$

para una sola partícula. Donde las soluciones son [1]

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$$

¿Cómo se describe la dinámica de un sistema de N partículas?

La dinámica de un sistema de N partículas sin efectos de espín, viene dada por

$$\begin{gathered} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N, t) = \hat{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N, t); \\ \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N, t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N)e^{-iEt/\hbar} \end{gathered} \tag{1}$$

Donde la ecuación anterior se cumple si el hamiltoniano es independiente del tiempo. [3]

$$\hat{H} = -\sum_{j=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m_j}\nabla_j^2 + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N)$$

con E la **la energía total del sistema** y se cumple $\hat{H}\psi = E\psi$.

Sistema de N partículas distinguibles

Estos sistemas son difíciles pero no imposibles de resolver. Sin embargo, en el caso especial en el que **las partículas no interactúan**, que se refiere a *un sistema de partículas independientes*, la ecuación de Schrodinger puede reducirse trivialmente a N ecuaciones de 1 partícula (2). Si las partículas fueran **distinguibles** la función de onda que describe el sistema sería el **producto de las funciones de onda individuales**.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2 + V_i(\xi_i)\right]\psi_{n_i}(\xi_i) = \epsilon_{n_i}\psi_{n_i}(\xi_i) \tag{2}$$

$$\psi_{n_1,n_2,\ldots,n_N}(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N) = \prod_{i=1}^{N}\psi_{n_i}(\xi_i); \quad E_{n_1,n_2,\ldots,n_N} = \sum_{i=1}^{N}\epsilon_{n_i}$$

Esta es nuestra situación dado que estamos hablando de un pozo de potencial, es decir, no existen términos extra de interacción en el potencial. Como interacciones de Coulomb en el caso de fermiones u otras interacciones en el caso de bosones.

Simetría de intercambio

Empleamos el operador P_{ij} (operador de permutación) que intercambia la partícula i con la partícula j. En general $P_{ij} = P_{ji}$, pero estos operadores no conmutan entre sí.

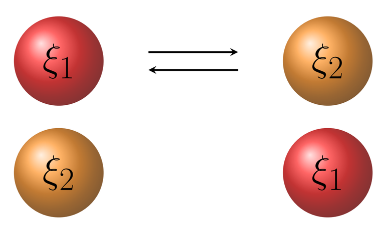
Ejemplos

$$P_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1)$$

y además vemos qu e

$$P_{12}^2\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_1, \xi_2)$$

lo que nos dice que $P_{ij}^2 = 1$, es decir, posee 2 eigenvalores, ± 1. Las funciones de onda con eigenvalor +1 son simétricas y aquellas con eigenvalor -1 son antisimétricas.



Sistema de N partículas indistinguibles

En **mecánica clásica**, las partículas idénticas son distinguibles. Conservan su identidad.
En **mecánica cuántica**, las partículas idénticas son indistinguibles. Pierdan su identidad.
En un sistema de N partículas idénticas solo pueden medirse las probabilidades de que alguna partícula esté en cada coordenada.

La **probabilidad debe permanecer inalterada** en caso de intercambio de partículas.

$$|\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, i, \ldots, j, \ldots, \xi_N)|^2 = |\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, j, \ldots, i, \ldots, \xi_N)|^2$$

por lo tanto

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, i, \ldots, j, \ldots, \xi_N) = \pm\psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, j, \ldots, i, \ldots, \xi_N)$$

La física debería ser invariante bajo el intercambio de 2 partículas del mismo tipo.
La función de onda de un sistema de N partículas idénticas debe ser

- **Simétrica** correspondiente a bosones.
- **Antisimétrica** correspondiente a fermiones.

bajo el intercambio de cualquier par de partículas.[2]

Construcción de funciones simétricas y antisimétricas

Partiendo de cualquier función de onda asimétrica normalizada $\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ podemos construir funciones de onda **simétricas** y **antisimétricas**

$$\begin{aligned} \psi_s(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}[&\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3) + \psi(\xi_1, \xi_3, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_3, \xi_1) \\ &\psi(\xi_2, \xi_1, \xi_3) + \psi(\xi_3, \xi_1, \xi_2) + \psi(\xi_3, \xi_2, \xi_1)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_a(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}[&\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3) - \psi(\xi_1, \xi_3, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_3, \xi_1) \\ &-\psi(\xi_2, \xi_1, \xi_3) + \psi(\xi_3, \xi_1, \xi_2) - \psi(\xi_3, \xi_2, \xi_1)] \end{aligned}$$

Función de onda para un sistema de N partículas idénticas que no interactúan.

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \hat{P}\psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2)\cdots\psi_{n_N}(\xi_N)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\xi_1) & \psi_{n_1}(\xi_2) & \cdots & \psi_{n_1}(\xi_N) \\ \psi_{n_2}(\xi_1) & \psi_{n_2}(\xi_2) & \cdots & \psi_{n_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(\xi_1) & \psi_{n_N}(\xi_2) & \cdots & \psi_{n_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

Principio de exclusión de Pauli

Dos fermiones no pueden ocupar el mismo estado cuántico simultáneamente. En general: $\psi(\xi_i, \xi_j) = -\psi(\xi_j, \xi_i)$. En particular si ocupan el mismo estado $\xi_i = \xi_j$, entonces:

$$\psi(\xi_i, \xi_i) = -\psi(\xi_i, \xi_i) = 0$$

Así, cuando dos fermiones idénticos tienen el mismo estado cuántico, el valor de la función de onda asociada desaparece.

Separabilidad de grados de libertad

La función de onda de una partícula cuántica puede escribirse como el producto de su parte espacial y su parte espinorial debido a la separabilidad de los grados de libertad espaciales y de espín en ciertos sistemas físicos. Cuando las interacciones que involucran el espín de la partícula no dependen explícitamente de su posición y lo mismo a la inversa. $\psi(t, \xi, S) = \phi(t, \xi)\chi(S)$.

Problema:

Encontrar el estado fundamental y la función de onda correspondiente de un sistema de N partículas idénticas que están confinadas en un pozo infinito de potencial unidimensional cuando las partículas son bosones y fermiones.

1. Bosones:

En el caso de una partícula que se mueve en un pozo infinito, su energía y función de onda son $\varepsilon_n = n^2\hbar^2\pi^2/\left(2ma^2\right)$ y $\psi_n(x_i) = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x_i/a)$. (a) En el caso en que las N partículas sean bosones, el estado fundamental se obtiene poniendo todas las partículas en el estado $n = 1$; la energía y la función de onda se dan entonces por

$$E^{(0)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \cdots + \varepsilon_1 = N\varepsilon_1 = \frac{N\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \prod_{i=1}^{N}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x_i\right)$$

2. Fermiones:

En el caso en que las N partículas sean fermiones de espín $\frac{1}{2}$, cada nivel puede estar ocupado como máximo por dos partículas que tengan estados de espín diferentes $\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$. El estado fundamental se obtiene entonces distribuyendo las N partículas entre los $N/2$ niveles más bajos a razón de dos partículas por nivel:

$$E^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}\sum_{n=1}^{N/2}n^2$$

Si N es grande podemos demostrar que la energía del estado fundamental estará dada por

$$E^{(0)} \simeq N^3\frac{\hbar^2\pi^2}{24ma^2}$$

La energía media por partícula es $E^{(0)}/N \simeq N^2\hbar^2\pi^2/\left(24ma^2\right)$. En el caso en que N sea par, una posible configuración de la función de onda del estado fundamental $\psi^{(0)}(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ se da de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_1(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_1(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_2(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_2(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_3(x_1)\chi(S_1) & \psi_3(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_3(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_3(x_1)\chi(S_1) & \psi_3(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_3(x_N)\chi(S_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{N/2}(x_1)\chi(S_1) & \psi_{N/2}(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_{N/2}(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_{N/2}(x_1)\chi(S_1) & \psi_{N/2}(x_2)\chi(S_2) & \cdots & \psi_{N/2}(x_N)\chi(S_N) \end{vmatrix},$$

donde $\chi(S_i) = \left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle$ es el estado de espín de la i ésima partícula, con $i = 1, 2, 3, \ldots, N$. Si N es impar, entonces necesitamos eliminar la última fila del determinante.[4]

Referencias

[1] Bernard Diu Claude Cohen-Tannoudji and Franck Laloé. *Quantum Mechanics Volume I: Basic Concepts, Tools, and Applications*. WILEY-VCH, 2020.

[2] Instituto de Física Teórica IFT. Bosones y fermiones, como nunca te los habían explicado, 2021.

[3] J. J. SAKURAI. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2021.

[4] Nouredine Zettili. *Quantum Mechanics Concepts and Applications*. Jacksonville State University, Jacksonville, USA, 2009.