

Partículas idénticas

Este concepto surge ante el tratamiento de sistemas de muchas partículas y su indistinguibilidad en la mecánica cuántica

Ejemplos: Átomos, moléculas, núcleos, etc.

•

Definición de partículas idénticas:

Dos partículas son idénticas si todas sus propiedades intrínsecas (masa, spin, carga, etc.) son las mismas.

- **Ningún experimento puede distinguir una de la otra.**
-

Los estados de una partícula en mecánica clásica queda especificado por su posición y velocidad en cierto punto del espacio y su posterior evolución.

- ***En física clásica el problema de la indistinguibilidad no se presenta ya que en esta las partículas siguen una trayectoria bien definida que permite distinguir unas de otras.***

Los estados de las partículas cuánticas están especificados por un conjunto de números cuánticos.

- ***Recordar que en mecánica cuántica no hay trayectorias.***
-

Este tratatamiento dentro del formalismo de la Mecánica Cuántica amerira la consideración de

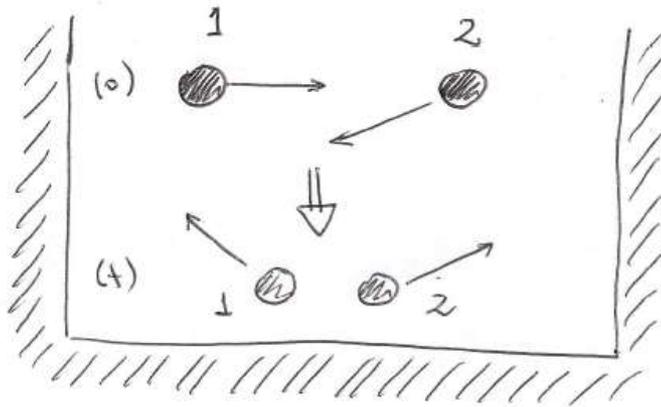
- *El problema de la indistiguibilidad*
 - *Principio de incertidumbre*
-

Indistinguibilidad – Incerteza (σ)

DOS PARTÍCULAS EN UNA CAJA UNIDIMENSIONAL

CASO CLÁSICO

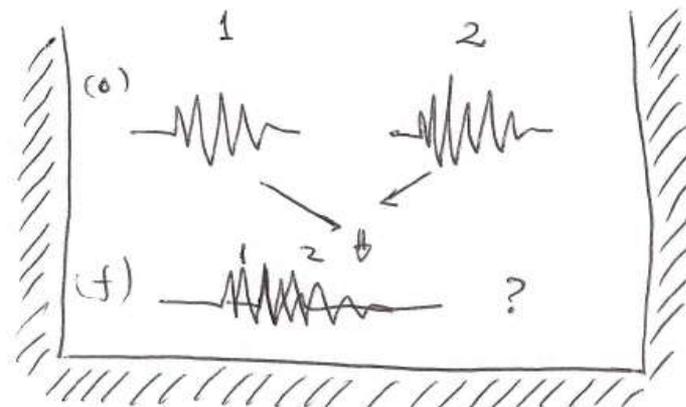
PARTÍCULA 
 $V=0$ (DISPERSIÓN)



se conoce el estado final

CASO CUÁNTICO

PARTÍCULA 
 V (DISPERSIÓN)



no se conoce el estado final

- **Dificultad:** si se quiere calcular la probabilidad de alguna medición se necesita conocer el estado final
-

- **Origen del problema: el INTERCAMBIO de las partículas durante el proceso**

**¿cuál de los dos estados posibles es el resultante?
¿cómo se calculan las probabilidades de ambos?
¿proveen los mismos resultados?**

Veamos el tratamiento del problema mediante el caso de dos partículas no interactuantes

$$\mathcal{H}_0 = h(1) + h(2)$$

$$1 \equiv (\vec{r}_1, \sigma_1) \quad 2 \equiv (\vec{r}_2, \sigma_2)$$

$$\{ h(1) + h(2) \} \Psi(1,2) = E \Psi(1,2)$$

Por separación de variables

$$\Psi(1,2) = \Psi_a(1) \Psi_b(2)$$

a, b: qto. de índices que definen el estado de las partículas

$$E = E_a + E_b \quad \text{sc.}$$

$$h(1) \Psi_a(1) = E_a \Psi_a(1)$$

$$h(2) \Psi_b(2) = E_b \Psi_b(2)$$

Ambos estados son solución de la ecuación de Schrödinger y degenerados

A handwritten diagram illustrating the decomposition of a two-particle wave function $\Psi(1,2)$ into two degenerate states. At the top center, the expression $\Psi(1,2)$ is written. Two arrows originate from this expression: one points down and to the left towards the equation $\Psi_{ab}(1,2) = \Psi_a(1) \Psi_b(2)$, and the other points down and to the right towards the equation $\Psi_{ba}(1,2) = \Psi_b(1) \Psi_a(2)$. The two equations are separated by a semicolon.

$$\Psi(1,2)$$
$$\Psi_{ab}(1,2) = \Psi_a(1) \Psi_b(2) ; \quad \Psi_{ba}(1,2) = \Psi_b(1) \Psi_a(2)$$

Las dos densidades de probabilidad serán entonces

$$\Psi_{ab}^* \Psi_{ab} = |\Psi_{ab}|^2$$

$$= \Psi_a^*(1) \Psi_b^*(2) \Psi_a(1) \Psi_b(2)$$

$$\Psi_{ba}^* \Psi_{ba} = \Psi_b^*(1) \Psi_a^*(2) \Psi_b(1) \Psi_a(2)$$

Que ante el intercambio de partículas deberían ser iguales por la identidad de las mismas

$$\Psi_{ab}^* \Psi_{ab} \xrightarrow{1 \rightleftharpoons 2} \Psi_a^*(2) \Psi_b^*(1) \Psi_c(2) \Psi_b(1) \\ \equiv \Psi_{ba}^* \Psi_{ba}$$

POR LO TANTO SON **INACEPTABLES** PARA DESCRIBIR UN SISTEMA DE PARTICULAS IDENTICAS

Considerando,

- Cada uno de estos estados representa el mismo estado físico

DEGENERACIÓN DE INTERCAMBIO

- Esto genera dificultades esenciales en nuestro camino

LA DEGENERACIÓN DEBE SER REMOVIDA

- La linealidad de la ecuación de Schrödinger, induce a probar una solución más general como una combinación lineal de ambas

$$\Psi(1,2) = A \Psi_{ab}(1,2) + B \Psi_{ba}(1,2)$$

- No hay estados privilegiados, ambos coeficientes deben tener el mismo módulo. Estas son la únicas formas que preservan la forma física adecuada, es decir que ambas soluciones tengan el mismo "peso". Por ello, estas dos soluciones degeneradas son su suma o su resta,

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{ab} + \Psi_{ba})$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{ab} - \Psi_{ba})$$

Cuyas densidades de probabilidad ahora resultan

$$|\Psi_S|^2 = \frac{1}{2} (\Psi_{ab}^* \Psi_{ab} + \Psi_{ba}^* \Psi_{ba})$$
$$+ \frac{1}{2} (\Psi_{ba}^* \Psi_{ab} + \Psi_{ab}^* \Psi_{ba})$$

1a

$$|\Psi_A|^2 = \frac{1}{2} (\Psi_{ab}^* \Psi_{ab} + \Psi_{ba}^* \Psi_{ba})$$
$$- \frac{1}{2} (\Psi_{ba}^* \Psi_{ab} + \Psi_{ab}^* \Psi_{ba})$$

1b

Que ante intercambio de las partículas se comportan según

$$\Psi_S \quad 1 \longleftrightarrow 2 \quad \Psi_S$$

Simétrica

$$\Psi_A \quad 1 \longleftrightarrow 2 \quad -\Psi_A$$

Antisimétrica

Ambas funciones tienen la misma energía que cada una de las cuales son combinación

**Consecuencia de estos resultados introduce el siguiente
POSTULADO que da cuenta de ello**

POSTULADO DE SIMETRIZACIÓN

Cuando un sistema está formado por varias partículas idénticas, los estados físicos del sistema solo pueden ser descritos por cierto tipo de funciones de estados dependiendo de la naturaleza de las partículas idénticas.

Estados completamente simétricos (S) o completamente antisimétricos (A) respecto de la permutación de las partículas.

Aquellas partículas cuyos estados sean S se denominan **BOSONES**, mientras aquellas que se comporten como A, **FERMIONES**.

La naturaleza física de la partículas obedecen reglas empíricas:

FERMIONES ***Spin semi-entero (1/2, 3/2, 5/2,)***

BOSONES ***Spin entero (0,1,2,)***

- **Observando las funciones propias antisimétrica y simétrica del sistema de dos partículas idénticas, se puede notar que la forma matemática es la de un permanente/determinante, respectivamente**
-

$$\Psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Psi_a(1) & \Psi_a(2) \\ \Psi_b(1) & \Psi_b(2) \end{vmatrix}_+$$

2a

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \Psi_a(1) & \Psi_a(2) \\ \Psi_b(1) & \Psi_b(2) \end{vmatrix}_-$$

2b

Nótese que en 2b, si

$\Psi_a = \Psi_b$ ambos estados son iguales $\rightarrow \Psi(1, 2) = 0$

Construcción del estado físico del sistema

- Se numeran todas las partículas idénticas y se construye una función de estado correspondiente a ese número de partículas

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \underbrace{\psi_a(1) \psi_b(2) \dots \psi_k(N)}_{\text{producto de } N \text{ funciones de estado de 1-partícula}}$$

- Se aplican las reglas de simetrización según sean bosones o fermiones
- Se normaliza el estado

de esto RESULTA

Generalizando, la forma de las funciones de estado S y A, se expresan por

$$\Psi_{S/A}(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \Psi_2(1) & \Psi_3(1) & & \Psi_N(1) \\ \Psi_1(2) & \Psi_2(2) & \Psi_3(2) & & \Psi_N(2) \\ \vdots & & & & \vdots \\ \Psi_1(N) & & & \Psi_{N-1}(N) & \Psi_N(N) \end{vmatrix}_{+/-}$$

Esto es lo que se denomina la construcción de los **estados físicos del sistema**

Antes de comenzar con la interpretación y consecuencias de esta construcción surge una pregunta en forma natural

¿La función de estado es siempre simétrica o antisimétrica?

La respuesta se encuentra observando la ecuación de evolución

$$\Psi(1, 2, \dots, N; t)$$

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

$$\Psi(1, 2, \dots, N; t + dt) = \Psi(1, 2, \dots, N; t)$$

$$+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} \cdot dt$$

$$\underbrace{\frac{\hat{H} \Psi}{i\hbar}}$$

• \hat{H} es SIMÉTRICO

• $\hat{H} \Psi \rightarrow$ misma simetría que Ψ



$\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ CONSERVA LA SIMETRÍA ANTE LA EVOLUCIÓN

Consecuencias e Interpretaciones

FERMIONES

Siguen un Principio de exclusión:

No puede haber dos fermiones con el mismo conjunto de número cuánticos, es decir no puede haber dos fermiones en el mismo estado.

Esto implicaría que dos columnas en el determinante se repitiesen y como es bien sabido, esto lo anula.

Surge de la observación de los espectros atómicos y lo vamos a aplicar luego cuando estudiemos los elementos de la teoría de los Átomos.

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \dots + \varepsilon_N$$

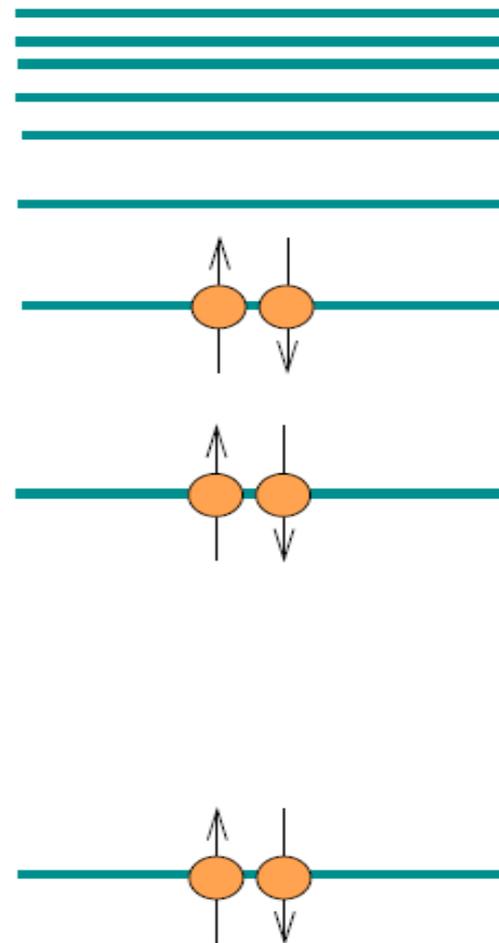
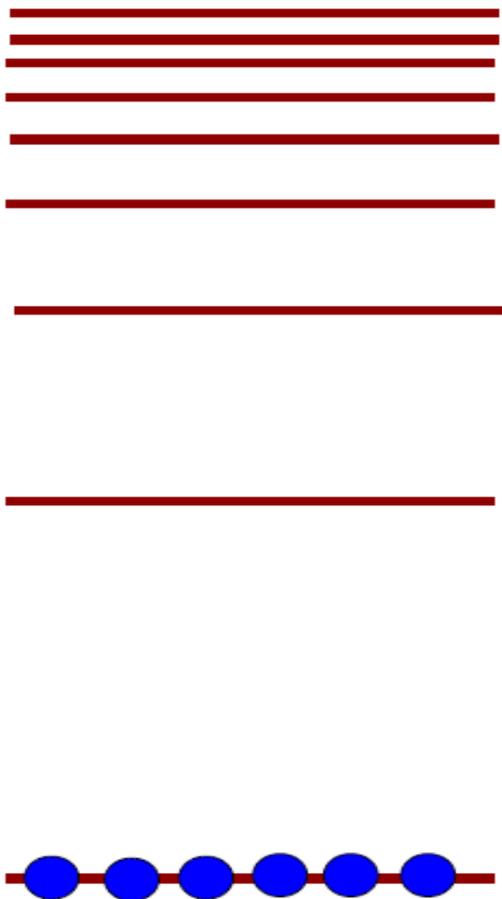
BOSONES

No cumplen el principio de exclusión. Pueden presentar condensación: varias partículas en un mismo estado.

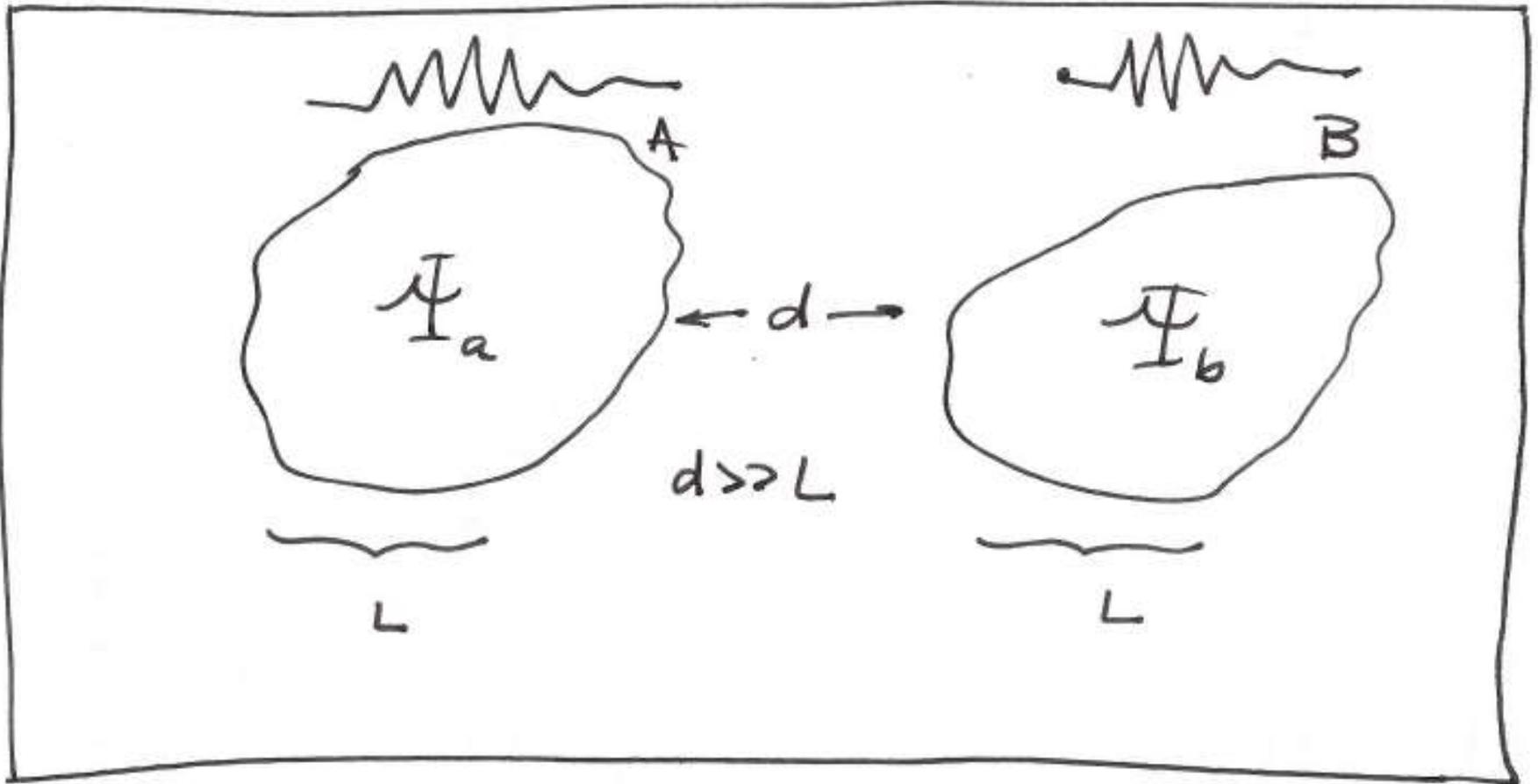
La expresión para la energía es idéntica a la de fermiones pero al no seguir un principio de exclusión, puede haber muchas partículas en un mismo estado. En particular presentan estados que muestran CONDENSACIÓN

$$E = N\varepsilon_1$$

Gráficamente,



Situaciones cuando el postulado de simetrización se puede ignorar



$\Psi_a \neq 0$ sobre **A**

$\Psi_b \neq 0$ sobre **B**

En este caso los segundo miembros de las fórmulas de la densidad de probabilidad (1a) y (1b) se anulan. Entónces,

$$|\Psi_S|^2 = |\Psi_A|^2$$

Y ambas distribuciones son iguales.

Ejemplo de 2 estados de electrones

$$\begin{aligned} {}^1\Psi(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi(1)\alpha(1) & \varphi(1)\beta(1) \\ \varphi(2)\alpha(2) & \varphi(2)\beta(2) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi(1)\alpha(1)\varphi(2)\beta(2) - \varphi(1)\beta(1)\varphi(2)\alpha(2)] \\ &= \underbrace{\varphi(1)\varphi(2)}_{\text{Simétrica}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]}_{\text{Antisimétrica}} . \end{aligned}$$

El spin total del sistema es nulo ya que la suma de las proyecciones individuales resulta nula y esta suma es la única proyección total del spin del sistema.

Un estado tal de dos fermiones de spin $\frac{1}{2}$ con proyecciones antiparalelas es un

ESTADO SINGLETE

ESTADO CON MAXIMA PROYECCION DE SPIN

$$\begin{aligned} {}^3\Psi(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\alpha(1) & \varphi_2(1)\alpha(1) \\ \varphi_1(2)\alpha(2) & \varphi_2(2)\alpha(2) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(1)\alpha(1)\varphi_2(2)\alpha(2) - \varphi_2(1)\alpha(1)\varphi_1(2)\alpha(2)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{[\varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_2(1)\varphi_1(2)]}_{\text{Antisimétrica}} \underbrace{\alpha(1)\alpha(2)}_{\text{Simétrica}} . \end{aligned}$$

El spin de este sistema es 1, ya que la proyección máxima de spin, suma de las proyecciones individuales resulta igual 1.

Nótese: 1) $\varphi_1 = \varphi_2$, la función se anula (princ. de exclusión o Pauli)

2) lo mismo vale para el estado con $\beta\beta$ (proyección -1)

3) No obstante además de estas proyecciones, son compatibles y degeneradas, las proyecciones $\alpha\beta$ ($\beta\alpha$) con proyección 0.

Un estado tal de dos fermiones de spin $\frac{1}{2}$ con proyecciones paralelas deriva en tres estados con igual número de spin y diferentes proyecciones.

ESTADO TRIPLETE

- Esto es consecuencia directa de la antisimetría de la función de estado de los dos fermiones spin $\frac{1}{2}$.
 - Si las proyecciones de spin son paralelas, $\alpha\alpha$ ó $\beta\beta$, vemos que no pueden compartir la misma función espacial. Lo mismo no ocurre en el caso de los singletes.
-