

Sistemas cuánticos de varias partículas

Vimos espacios de Hilbert que son un **producto tensorial**, por ejemplo:

- Partícula en espacio 3-dimensional: $\mathcal{E}_{xyz} = \mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z$

- Una partícula con espín: $\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$

Para sistemas de varias partículas también tenemos:

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

Sistemas de varias partículas

Ejemplo: dos partículas (por ahora pueden ser distinguibles)

- Espacio de Hilbert: $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \longrightarrow |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ *Estado producto*

- Bases: $\left\{ \begin{array}{l} \{ |u_i(1)\rangle \} \\ \{ |v_l(2)\rangle \} \end{array} \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} |\varphi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle \\ |\chi(2)\rangle = \sum_l b_l |v_l(2)\rangle \end{array} \right.$

- Base del espacio producto: $\{ |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \}$

$\longrightarrow |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_{i,l} a_i b_l |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle$ *Expansión del estado producto*

- **Estado general:** $|\psi\rangle = \sum_{i,l} c_{i,l} |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle$
(no necesariamente producto)

- Operadores: $[A(1) \otimes B(2)] [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [A(1)|\varphi(1)\rangle] \otimes [B(2)|\chi(2)\rangle]$

Partículas idénticas o indistinguibles

Supongamos dos partículas idénticas, p. ej. 2 electrones.

Ahora los dos espacios de Hilbert en $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ son iguales.

Hay un problema: $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = |\varphi(2)\rangle \otimes |\chi(1)\rangle$

—► dos kets distintos representan el mismo estado: degeneración de intercambio

Por más que haga una medición completa sobre cada partícula, no puedo determinar unívocamente el estado completo (de 2 part.) después de la medición.

POSTULADO DE SIMETRIZACION

Cuando un sistema incluye varias partículas idénticas, sólo ciertos kets de su espacio de estados pueden describir estados físicos.

Los kets físicos son completamente:

- Simétricos: Bosones Espin entero
- Antisimétricos: Fermiones Espin semientero

Frente al intercambio de partículas.

Operador de permutación de 2 partículas: Transposición

-- Implementación del postulado de simetrización --

Partimos de una base de estados producto: $\{ |1 : u_i; 2 : u_j\rangle \}$

Definimos el operador de permutación de 2 partículas o Transposición por su acción sobre los estados de la base:

$$P_{21} |1 : u_i; 2 : u_j\rangle = |2 : u_i; 1 : u_j\rangle = |1 : u_j; 2 : u_i\rangle$$

Propiedades (demostrar): $(P_{21})^2 = 1$ $P_{21}^\dagger = P_{21}$ Hermítico

$P_{21}^\dagger P_{21} = P_{21} P_{21}^\dagger = 1$ Unitario \longrightarrow Autovalores: +1 y -1

Auto-estados:
$$\begin{cases} P_{21} |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \\ P_{21} |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \end{cases}$$

$$\begin{cases} S = \frac{1}{2}(1 + P_{21}) \\ A = \frac{1}{2}(1 - P_{21}) \end{cases}$$

Proyectan sobre los subespacios de kets simétricos y antisimétricos

Permutación de partículas: ejemplo N=3

Con 3 partículas tenemos: $\{ | 1 : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k \rangle \}$

Y 6 operadores de permutación: $P_{123}, P_{312}, P_{231}, P_{132}, P_{213}, P_{321}$

Por ejemplo:
$$P_{231} | 1 : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k \rangle = | 2 : u_i; 3 : u_j; 1 : u_k \rangle$$
$$= | 1 : u_k; 2 : u_i; 3 : u_j \rangle$$

Se puede ver: Forman un grupo no conmutativo.

Transposiciones – sólo intercambian un par de partículas:

$$P_{123}, P_{312}, P_{231}, P_{132}, P_{213}, P_{321}$$

Se puede ver: toda permutación se puede expresar como producto (no único) de transposiciones.

La paridad del número de transposiciones está bien definida: **Paridad de la permutación**

Permutación de N partículas

Supongamos N partículas. Sea: P_α : permutación arbitraria de las N partículas.
Hay N! permutaciones

Si: $P_\alpha |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \longrightarrow |\psi_S\rangle$ es completamente simétrico

Si: $P_\alpha |\psi_A\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_A\rangle \longrightarrow |\psi_A\rangle$ es completamente antisimétrico

$$\varepsilon_\alpha = +1 \quad \text{if } P_\alpha \text{ is an even permutation}$$

$$\varepsilon_\alpha = -1 \quad \text{if } P_\alpha \text{ is an odd permutation}$$

Notar: para $N > 2$ la unión de los subespacios S y A no contiene todo el Espacio de Hilbert. Como las permutaciones no conmutan, no es posible encontrar una base de autoestados comunes de todas ellas.

Definición importante:

$$\left\{ \begin{array}{l} S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \quad \text{Simetrizador} \\ A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} \quad \text{Antisimetrizador} \end{array} \right.$$

$$S^2 = S$$

$$A^2 = A$$

\longrightarrow Son “proyectores” sobre los subespacios \mathcal{E}_S y \mathcal{E}_A

Construcción de una base de estados de N partículas idénticas

(1) Tomar una base del espacio de 1 partícula: $\{ |u_i\rangle \}$

- (2) – Numerar las partículas de 1 a N
– “Ubicarlas” en estados de partícula única a gusto
– Formar un estado producto:

$$|1 : u_i; 2 : u_j; \dots; N : u_p\rangle$$

(3) Aplicar S para bosones y A para fermiones

(4) Normalizar el estado obtenido. Se multiplica por:

$$\begin{cases} \sqrt{N!/n_1! n_2! \dots} & \text{bosones} \\ \sqrt{N!} & \text{fermiones} \end{cases}$$

Notar: los bosones pueden “repetir” los orbitales, con ocupaciones n_1, n_2, \dots generales, pero los fermiones no, sólo tienen ocupaciones = 0, 1 en estados producto.

Ejemplo: N partículas independientes

Supongamos que las N partículas no interactúan entre sí.

El Hamiltoniano total es la suma de los individuales:

$$H(1, 2, \dots, N) = h(1) + h(2) + \dots + h(N)$$

La estrategia es resolver primero el problema de partícula única:

$$h(j) | \varphi_n \rangle = e_n | \varphi_n \rangle; \quad | \varphi_n \rangle \in \mathcal{E}^j(j)$$

Los autovectores físicos de $H(1, 2, \dots, N)$ para **bosones** son:

$$| \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_N}^{(S)} \rangle = c \sum_{\alpha} P_{\alpha} | 1 : \varphi_{n_1}; 2 : \varphi_{n_2}; \dots; N : \varphi_{n_N} \rangle$$

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = e_{n_1} + e_{n_2} + \dots + e_{n_N}$$

Energía del **GROUND STATE**: $E_{1,1,\dots,1} = N e_1$ bosones

Ejemplo: N partículas independientes

Supongamos FERMIONES

Los autoestados de H son los Determinantes de Slater:

$$|\Phi_{1,2,\dots,N}^{(A)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |1:\varphi_2\rangle & \dots & |1:\varphi_N\rangle \\ |2:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \dots & |2:\varphi_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |N:\varphi_1\rangle & |N:\varphi_2\rangle & \dots & |N:\varphi_N\rangle \end{vmatrix}$$



Principio de Exclusión de Pauli

Si ordenamos las energías en orden creciente:

$$e_1 < e_2 < \dots < e_{n-1} < e_n < e_{n+1} < \dots$$

La energía del estado fundamental ahora es:

$$E_{1,2,\dots,N} = e_1 + e_2 + \dots + e_N$$



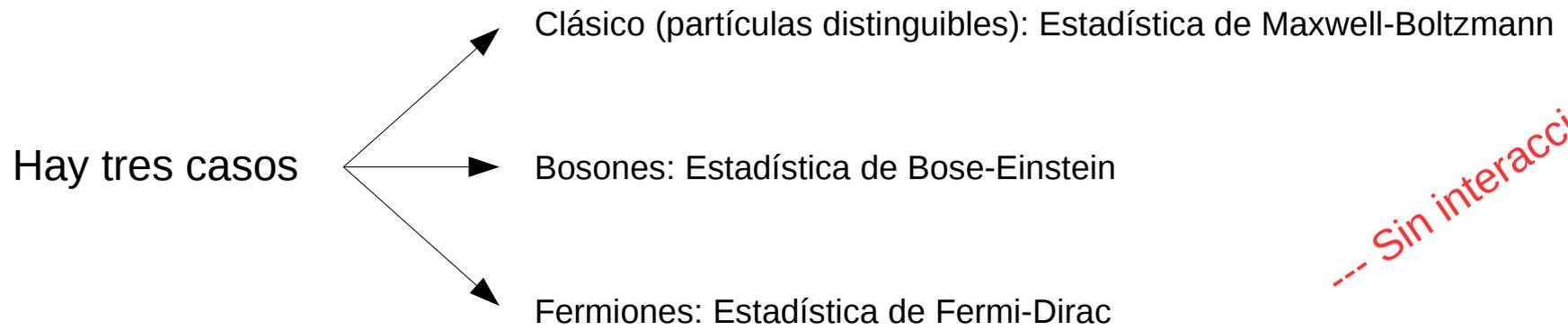
La energía individual más alta es la Energía de Fermi

Mecánica Estadística Cuántica

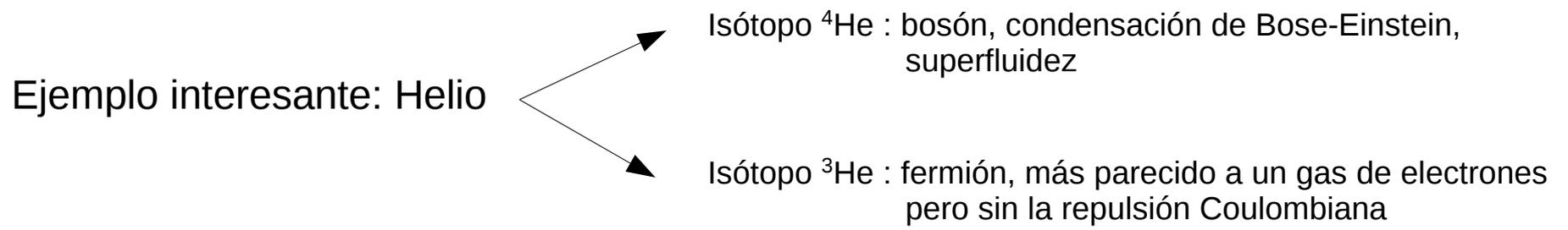
La mecánica estadística considera sistemas con un **número macroscópico** de partículas.

La pregunta es: como se deducen las pocas propiedades termodinámicas a partir de los estados microscópicos?

Hay que contar cuántos estados microscópicos corresponden a cada "estado" macroscópico.

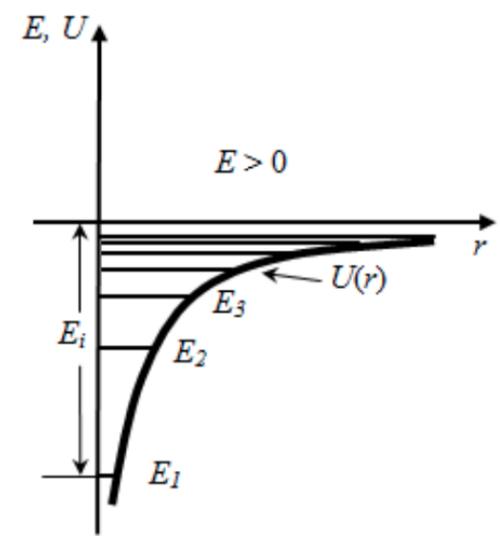
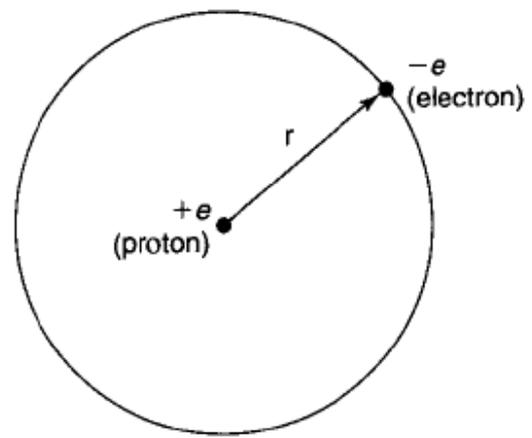


--- Sin interacción ---



Repaso: átomo de hidrógeno

Potencial del átomo de hidrógeno: $V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$



$$\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} = e^2$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_I$$

$$E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$$

$$E_I \simeq 13.6 \text{ eV}$$

$$r_n = n^2 a_0$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$$a_0 \simeq 0.52 \text{ \AA}$$

Repaso: átomo de hidrógeno

Algunas funciones de onda del átomo de Hidrógeno:

1s level	$\varphi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$
2s level	$\varphi_{n=2,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
2p level	$\begin{aligned}\varphi_{n=2,l=1,m=1} &= -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{i\varphi} \\ \varphi_{n=2,l=1,m=0} &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta \\ \varphi_{n=2,l=1,m=-1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{-i\varphi}\end{aligned}$

Repaso: átomo de hidrógeno

Dependencia angular de funciones de onda

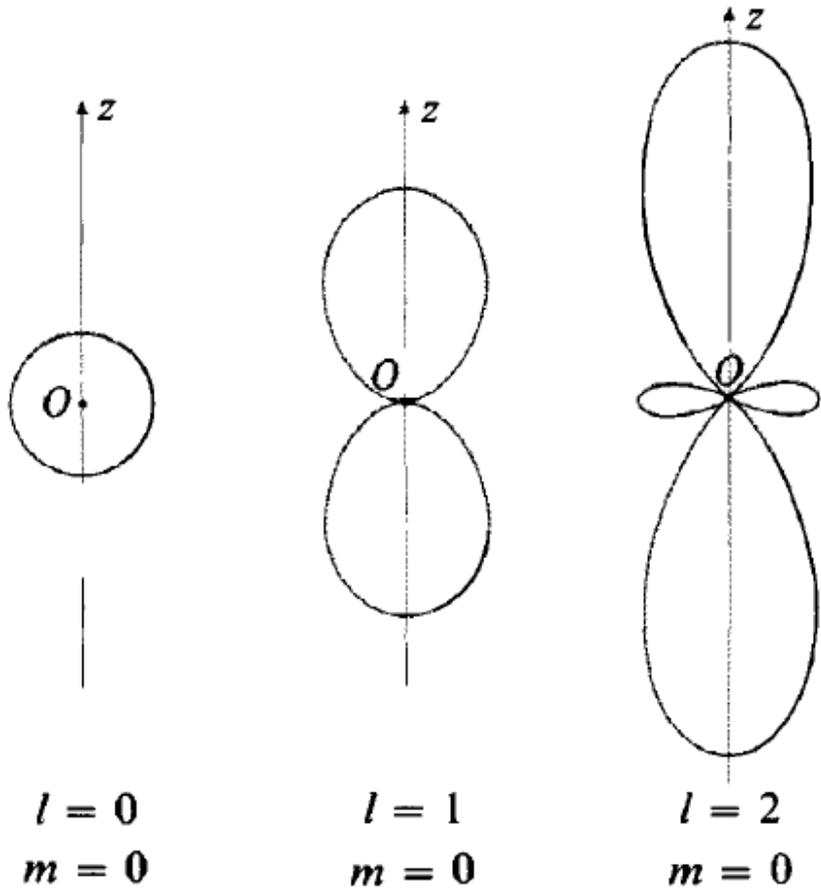


FIGURE 5

Angular dependence, $Y_l^m(\theta, \varphi)$, of some stationary wave functions of the hydrogen atom, corresponding to well-defined values of l and m . For each direction of polar angles θ, φ , the value of $|Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$ is recorded; a surface of revolution about the Oz axis is thus obtained. When $l = 0$, this surface is a sphere centered at O ; it becomes more complicated for higher values of l .

Átomo de varios electrones

Número atómico: Z

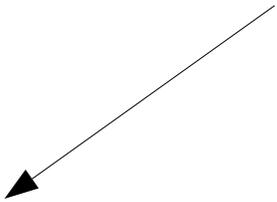
$$H = \sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{R_i} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}$$

Problema ya resuelto!

Interacción electrón-electrón

Imposible de resolver

$$e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$$



$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \chi_{\sigma}$$

$$\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Base de estados de partícula única

Números cuánticos: $\nu = \{n, l, m, \sigma\}$

1. Let h_0 be the Hamiltonian of a particle. Assume that the operator h_0 acts only on the orbital variables and has three equidistant levels of energies $0, \hbar\omega_0, 2\hbar\omega_0$ (where ω_0 is a real positive constant) which are non-degenerate in the orbital state space \mathcal{E}_r (in the total state space, the degeneracy of each of these levels is equal to $2s + 1$, where s is the spin of the particle). From the point of view of the orbital variables, we are concerned only with the subspace of \mathcal{E}_r spanned by the three corresponding eigenstates of h_0 .

a. Consider a system of three independent electrons whose Hamiltonian can be written:

$$H = h_0(1) + h_0(2) + h_0(3)$$

Find the energy levels of H and their degrees of degeneracy.

b. Same question for a system of three identical bosons of spin 0.

2. Dos electrones, antisimetrización, singlete y triplete

Sean dos electrones confinados en un potencial, y supongamos que alcanza con trabajar con dos orbitales $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$. Considerando también el grado de libertad de espín (ver la sección X-B de suma de dos espines $\frac{1}{2}$, y en concreto Ecs. B-22 y B-23), escribir los autoestados de H de los dos electrones y sus energías. El estado fundamental es triplete o singlete? Expresar también los estados usando los estados de espín no acoplados ($|s_1, s_2\rangle$).

3. Leer los enunciados de los problemas 3, 7, 8.I y 9.I del capítulo XIV del Cohen, que están incluidos en el complemento D_{XIV} .