Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

Partículas idénticas - Ejercicio 1

Hamiltoniano h_0, en variables orbitales

$\varepsilon_0 = 0$, $\varepsilon_1 = \hbar\omega_0$, $\varepsilon_2 = 2\hbar\omega_0$

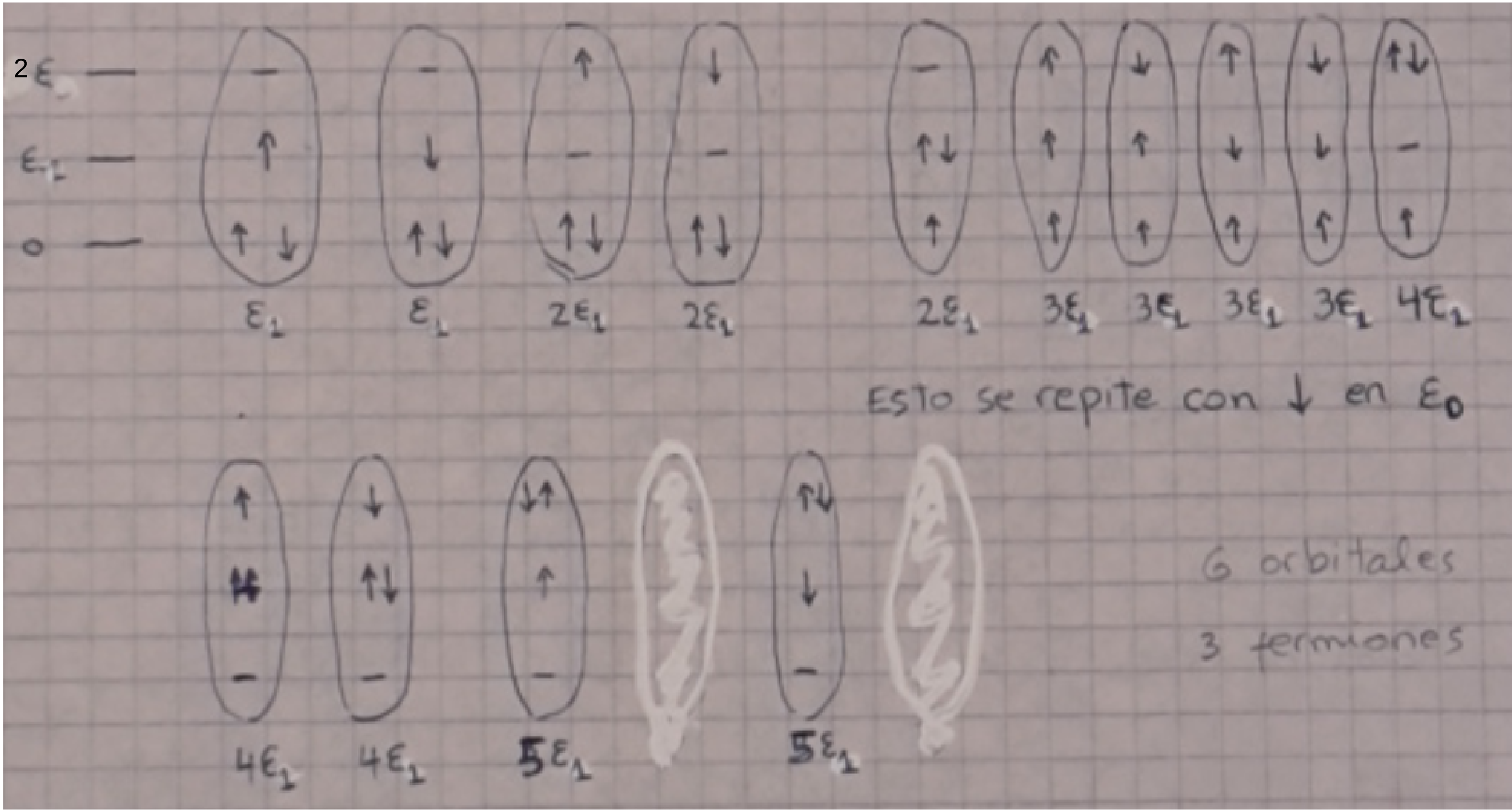
(Espin s, degeneración $2s+1$ de cada nivel.)

Espacio de estados orbitales : $\mathcal{E}_{\vec{r}}$

(a) Considerar un sistema de 3 electrones independientes con Hamiltoniano : $H = h_0(1) + h_0(2) + h_0(3)$

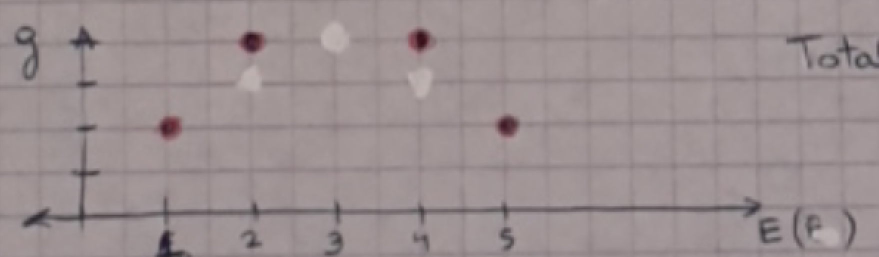
Encontrar los niveles de energía de H y su degeneración.

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación



$g(\varepsilon_1) = 2$ $\quad g(3\varepsilon_1) = 8$ $\quad g(5\varepsilon_1) = 2$

$g(2\varepsilon_1) = 4$ $\quad g(4\varepsilon_1) = 4$

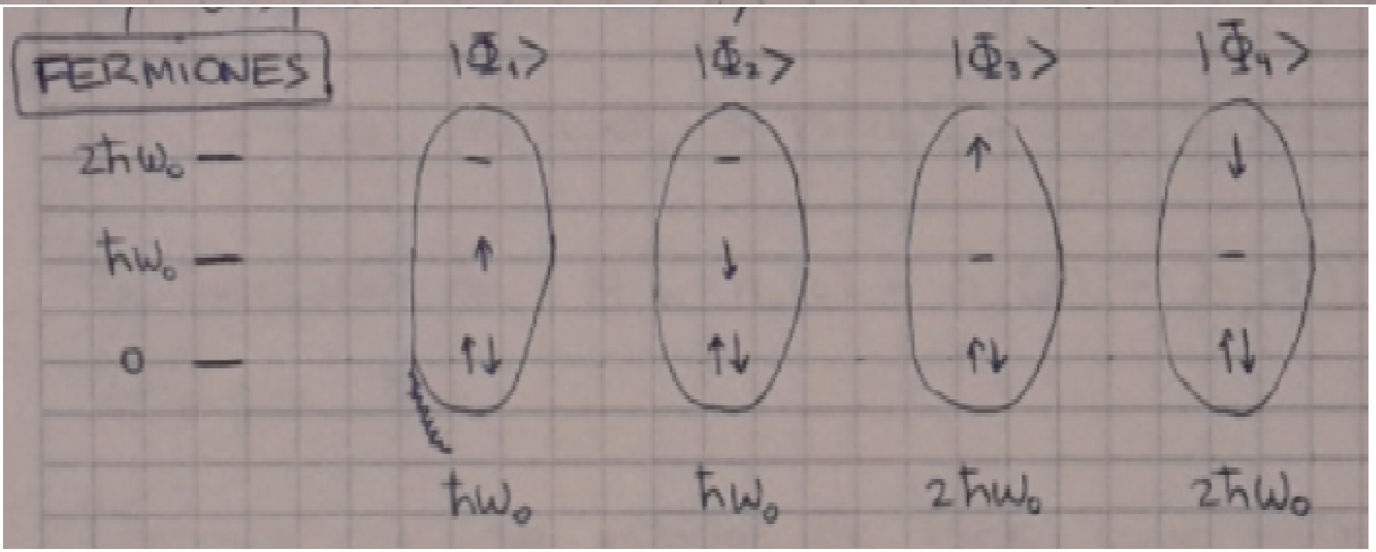


Total = 20

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

Guía 2 - Ejercicio 4

Escribir algunos de los estados del ejercicio 1 del cap. XIV de CtDL en las 3 notaciones usadas para designar estados de Fock ("number states").



Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

Estados de partícula única $\{|u_i\rangle\}$

Llamemos $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$ a los autoestados espaciales de h_0.

Numeramos los estados de partícula única:

$$|u_1\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\varphi_0, +\rangle$$

$$|u_2\rangle = |\varphi_0\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |\varphi_0, -\rangle$$

$$|u_3\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\varphi_1, +\rangle$$

$$|u_4\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |\varphi_1, -\rangle$$

$$|u_5\rangle = |\varphi_2\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\varphi_2, +\rangle$$

$$|u_6\rangle = |\varphi_2\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |\varphi_2, -\rangle$$

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

$$|\Phi_1\rangle = A \; |1:u_1\rangle \otimes |2:u_2\rangle \otimes |3:u_3\rangle$$

$$= \frac{\sqrt{3!}}{3!} \sum_{\alpha} \varepsilon_\alpha P_\alpha \; |1:u_1, 2:u_2, 3:u_3\rangle$$

NOTA

$$|\Phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} |1:u_1\rangle & |1:u_2\rangle & |1:u_3\rangle \\ |2:u_1\rangle & |2:u_2\rangle & |2:u_3\rangle \\ |3:u_1\rangle & |3:u_2\rangle & |3:u_3\rangle \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} \Big(|1:u_1\rangle \otimes |2:u_2\rangle \otimes |3:u_3\rangle + |1:u_3\rangle \otimes |2:u_1\rangle \otimes |3:u_2\rangle$$

$$+ |1:u_2\rangle \otimes |2:u_3\rangle \otimes |3:u_1\rangle - |1:u_3\rangle \otimes |2:u_3\rangle \otimes |3:u_1\rangle$$

$$- |1:u_1\rangle \otimes |2:u_3\rangle \otimes |3:u_2\rangle - |1:u_2\rangle \otimes |2:u_1\rangle \otimes |3:u_3\rangle \Big)$$

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

$$|\Phi_1\rangle = A\ |1:u_1\rangle \otimes |2:u_2\rangle \otimes |3:u_3\rangle$$

$$= \frac{\sqrt{3!}}{3!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha\ |1:u_1, 2:u_2, 3:u_3\rangle$$

Autoestado de $H = h_0(1) + h_0(2) + h_0(3)$ con energía $\hbar\omega_0$

Dijimos que 20 estados de Fock como éste.

Notaciones alternativas: $\quad |\Phi_1\rangle$

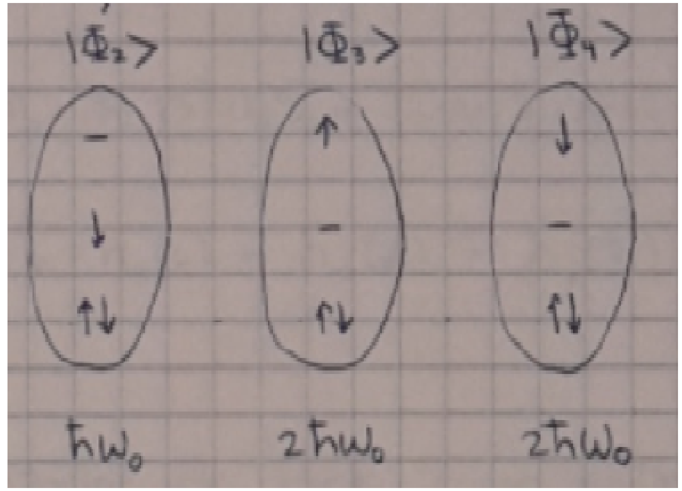
$|n_1\ n_2\ n_3\ n_4\ n_5\ n_6\rangle \qquad |1\ 1\ 1\ 0\ 0\ 0\rangle$

$|n_i\ n_j\ n_k\rangle \qquad |n_1 = 1,\ n_2 = 1,\ n_3 = 1\rangle$ **$= |1_1, 1_2, 1_3\rangle$**

$|u_i\ u_j\ u_k\rangle \qquad |u_1, u_2, u_3\rangle$

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

Más estados:



Veamos $|\Phi_2\rangle$, $|\Phi_3\rangle$, $|\Phi_4\rangle$

$$|\Phi_2\rangle = |1\,1\,0\,1\,0\,0\rangle = |n_1=1, n_2=1, n_4=1\rangle$$

$$= |u_1, u_2, u_4\rangle \quad = |1_1, 1_2, 1_4\rangle$$

$$|\Phi_3\rangle = |1\,1\,0\,0\,1\,0\rangle = |n_1=1, n_2=1, n_5=1\rangle$$

$$= |u_1, u_2, u_5\rangle \quad = |1_1, 1_2, 1_5\rangle$$

$$|\Phi_4\rangle = |1\,1\,0\,0\,0\,1\rangle = |n_1=1, n_2=1, n_6=1\rangle$$

$$= |u_1, u_2, u_6\rangle \quad = |1_1, 1_2, 1_6\rangle$$

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

Enumeremos todos los estados restantes:

$$|\Phi_5\rangle = |101100\rangle$$
$$|\Phi_6\rangle = |101010\rangle$$
$$|\Phi_7\rangle = |101001\rangle$$
$$|\Phi_8\rangle = |100110\rangle$$
$$|\Phi_9\rangle = |100101\rangle$$
$$|\Phi_{10}\rangle = |100011\rangle$$

$$|\Phi_{11}\rangle = |011100\rangle$$
$$|\Phi_{12}\rangle = |011010\rangle$$
$$|\Phi_{13}\rangle = |011001\rangle$$
$$|\Phi_{14}\rangle = |010110\rangle$$
$$|\Phi_{15}\rangle = |010101\rangle$$
$$|\Phi_{16}\rangle = |010011\rangle$$

$$|\Phi_{17}\rangle = |001110\rangle$$
$$|\Phi_{18}\rangle = |001101\rangle$$
$$|\Phi_{19}\rangle = |001011\rangle = |n_3=1,\ n_5=1,\ n_6=1\rangle = |1_3, 1_5, 1_6\rangle$$
$$|\Phi_{20}\rangle = |000111\rangle = |u_4,\ u_5,\ u_6\rangle = |1_4, 1_5, 1_6\rangle$$

$$\binom{n}{p} = \frac{n!}{p!\,(n-p)!} = \frac{6!}{3!\ 3!} = \frac{6.5.4.3.2}{3.2.3.2} = 20 \text{ estados}$$

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

BOSONES Con bosones teníamos 10 estados

Tenemos $|\varphi_0\rangle$, $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$ de partícula única.

Armamos estados producto : [redacted]

Este ya está simetrizado y normalizado:

$$|1:\varphi_0\rangle \otimes |2:\varphi_0\rangle \otimes |3:\varphi_0\rangle = |\Phi_1\rangle$$

Las otras notaciones: $|n_0\, n_1\, n_2\rangle = |3\ 0\ 0\rangle$

$|3_0\rangle = |n_0 = 3\rangle$ (sólo las ocupacione no nulas)

$|\varphi_0, \varphi_0, \varphi_0\rangle$ (los orbitales ocupados)

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

Siguiente estado: $|1:\varphi_0\rangle \otimes |2:\varphi_0\rangle \otimes |3:\varphi_1\rangle$

Hay que simetrizar: $|\Phi_2^S\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}\sqrt{2!}} \sum_P P\left[\varphi_0(1)\varphi_0(2)\varphi_1(3)\right]$

$$= \frac{1}{\sqrt{12}}\Big(\varphi_0(1)\varphi_0(2)\varphi_1(3) + \varphi_0(2)\varphi_0(3)\varphi_1(1) + \varphi_0(3)\varphi_0(1)\varphi_1(2)$$

$$+ \varphi_0(3)\varphi_0(2)\varphi_1(1) + \varphi_0(2)\varphi_0(1)\varphi_1(3) + \varphi_0(1)\varphi_0(3)\varphi_1(2)\Big)$$

Guía 2, Ejercicio 4: Partículas idénticas y números de ocupación

$$= \frac{1}{\sqrt{12}} \left(2\varphi_0(1)\varphi_0(2)\varphi_1(3) + 2\varphi_1(1)\varphi_0(2)\varphi_0(3) + 2\varphi_0(1)\varphi_1(2)\varphi_0(3) \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\varphi_0(1)\varphi_0(2)\varphi_1(3) + \varphi_1(1)\varphi_0(2)\varphi_0(3) + \varphi_0(1)\varphi_1(2)\varphi_0(3) \right)$$

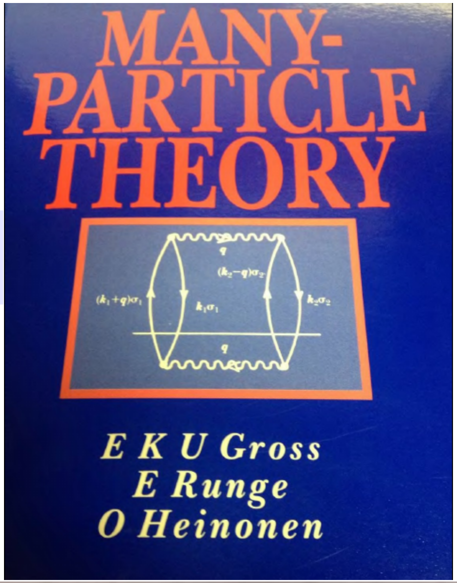
Ahora en las otras notaciones:

$$|n_0\, n_1\, n_2\rangle = |2\ 1\ 0\rangle$$

$$|n_0 = 2,\ n_1 = 1\rangle = |2_0,\ 1_1\rangle$$

$$|\varphi_0,\ \varphi_0,\ \varphi_1\rangle$$

Nuevo repaso de partículas idénticas - basado en:



$V(\vec{r})$: confina al electrón

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r})$$

posición

spin

$$x = \{\vec{r}, s\}$$

Autoestados: $\phi_\nu(x)$

Autoenergías: ε_ν

ν: conjunto de números cuánticos.

Nuevo repaso de partículas idénticas

Construcción de estados

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + u(x_i) \right) \qquad x = (\vec{r}, s)$$

Resolvemos el problema de una partícula:

$$\hat{h}\, \phi_\nu(x) = \varepsilon_\nu\, \phi_\nu(x) \Rightarrow \{\phi_\nu\}$$ base de "orbitales" ϕ_ν

Ej. $u(x) = -\frac{Ze^2}{r} \rightarrow \nu = (n, l, m, m_s)$

Nuevo repaso de partículas idénticas

Receta: para formar estados de Fock (number states) de N partículas

(1) Formar un estado producto: $\phi_{\nu_1}(x_1)\cdots\phi_{\nu_N}(x_N)$

Decimos que los orbitales $\nu_1\cdots\nu_N$ están ocupados.

(2) Aplicamos S o A

$$\Phi^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{N!}\sqrt{\prod_{k=1}^{K} n_k!}} \sum_{P\in S_N} P\left(\phi_{\nu_1}(x_1)\cdot\phi_{\nu_2}(x_2)\ldots\phi_{\nu_N}(x_N)\right)$$

$$\Phi^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P\in S} \mathrm{sgn}(P) P\left[\phi_{\nu_1}(x_1)\phi_{\nu_2}(x_2)\ldots\phi_{\nu_N}(x_N)\right]$$

(3) Normalizar

$\boxed{\text{Fermiones}}$ $\phi^{(A)}(x_1\ldots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\alpha \mathrm{sgn}(P_\alpha)\, P_\alpha\left[\phi_{\nu_1}(x_1)\ldots\phi_{\nu_N}(x_N)\right]$

$$\phi^{(A)}(x_1\cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \phi_{\nu_1}(x_1) & \cdots & \phi_{\nu_1}(x_N) \\ \vdots & & \\ \phi_{\nu_N}(x_1) & \cdots & \phi_{\nu_N}(x_N)\end{vmatrix}$$

Determinante de Slater

Nuevo repaso de partículas idénticas

Propiedades de los det. de Slater

i) $\nu_i = \nu_j \Rightarrow \phi^{(A)} = 0$ Pauli exclusion

$x_i = x_j \Rightarrow \phi^{(A)} = 0$

ii) Son autoestados del H no-interactuante (H_0)

$$H_0 \phi^{(S/A)} = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2 \nabla_i}{2m} + u(x_i) \right] \phi^{(S/A)}(x_1 \ldots x_N)$$

$$= \underbrace{\left(\sum_{i=N}^{N} \varepsilon_{\nu_i} \right)}_{\text{autovalor } E} \phi^{(S/A)}(x_1 \ldots x_N)$$

Ejercicio: demostrarlo explicitamente para $N=2$ $(\nu_1 \neq \nu_2)$

donde $H_0 = \hat{h}_1 + \hat{h}_2$

23/03/2012

Nuevo repaso de partículas idénticas

iii) Estado fundamental de dos partículas no-interactuantes

(Supongamos orbitales ordenados tal que $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3 \leq \dots$)

Bosones: $\nu_1 = \nu_2 = 1 \Rightarrow \phi^{(s)}(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\,\phi_1(x_2)$

Fermiones: $\nu_1 = 1,\ \nu_2 = 2 \Rightarrow \phi^{(a)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left[\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)\right]$

Nuevo repaso de partículas idénticas

Fermiones: ordenamiento de orbitales

Tomemos $\{\phi_\nu , \phi_\mu\}$ $\nu \neq \mu$

$$\phi^{(A)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \phi_\nu(x_1) & \phi_\nu(x_2) \\ \phi_\mu(x_1) & \phi_\mu(x_2) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[\phi_\nu(x_1)\,\phi_\mu(x_2) - \phi_\nu(x_1)\,\phi_\mu(x_2) \right]$$

Nuevo repaso de partículas idénticas

Si ordeno los orbitales al revés aparece un signo $-$.
Hay que ordenarlos al principio y mantener el orden
para trabajar. Entonces identificamos un determinante
de Slater dando una N-upla de números naturales:

$$c = (c_1, \ldots, c_N) \qquad c_i \in \mathbb{N} \qquad c_1 < c_2 < c_3 \ldots < c_N$$

$$\Phi_c^{(A)}(x_1, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_\alpha \operatorname{sgn}(P_\alpha)\, P_\alpha \left[\phi_{c_1}(x_1)\, \phi_{c_2}(x_2) \cdots \phi_{c_N}(x_N)\right]$$

base de espacio

Repaso de segunda cuantización

Muchos electrones: determinante de Slater

Ordenamos orbitales. Los denotamos con números naturales $c_i \in \mathbb{N}$

$$\Phi_c(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{c_1}(x_1) & \cdots & \phi_{c_1}(x_N) \\ \vdots & & \\ \phi_{c_N}(x_1) & \cdots & \phi_{c_N}(x_N) \end{vmatrix} \qquad c = \underbrace{(c_1 \cdots c_N)}_{N\text{-upla}}$$

- Están ocupados los "orbitales" $\{c_1, \ldots, c_N\}$
- Hubo que antisimetrizar ~~[illegible]~~ ○

$$\Phi(x_1 \cdots x_i \cdots x_j \cdots x_N) = -\Phi(x_1 \cdots x_j \cdots x_i \cdots x_N)$$

Repaso de segunda cuantización

Operadores de creación y destrucción

$\hat{c}_k : \quad \mathcal{H}(N) \longrightarrow \mathcal{H}(N-1)$ Destrucción o aniquilación

$\hat{c}^+_k : \quad \mathcal{H}(N) \longrightarrow \mathcal{H}(N+1)$ creación

Vimos que los determinantes de Slater $\Phi_c(x_1, \dots, x_N)$ forman una base del espacio de Hilbert de N fermiones $\mathcal{H}(N)$

Definimos la acción de $\hat{c}_n$ sobre esta base:

$\hat{c}_k \, \Phi_{(c_1 \cdots c_N)}(x_1 \cdots x_N) = 0$ si $k \notin \{c_1 \cdots c_N\}$

$\hat{c}_k \, \Phi_{(c_1 \cdots c_N)}(x_1 \cdots x_N) = (-1)^{j-1} \, \Phi_{(c_1 \cdots c_{j-1} c_{j+1} \cdots c_N)}(x_1 \cdots x_{N-1})$ si $k = c_j$

Repaso de segunda cuantización

$$\hat{c}_k \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{c_1}(x_1) & \cdots & \varphi_{c_1}(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{c_j}(x_1) & & \varphi_{c_j}(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{c_N}(x_1) & \cdots & \varphi_{c_N}(x_N) \end{vmatrix} = \frac{(-1)^{j-1}}{\sqrt{(N-1)!}} \begin{vmatrix} \cancel{\varphi_{c_j}(x_1)} & & \cancel{\varphi_{c_j}(x_N)} \\ \varphi_{c_1}(x_1) & \cdots & \varphi_{c_1}(x_N) \\ \vdots & \text{sin } \varphi_{c_j} & \\ \vdots & & \\ \varphi_{c_N}(x_1) & \cdots & \varphi_{c_N}(x_N) \end{vmatrix}$$

Los $\hat{c}_k$ son operadores lineales, es decir:

si $\Psi = \sum_c f_c \Phi_c \Rightarrow \hat{c}_k \Psi = \sum_c f_c \hat{c}_k \Phi_c$

Repaso de segunda cuantización

Representación de estados con números de ocupación

Hasta ahora: Determinante $\rightarrow$ $c = \{c_1, \dots, c_N\}$

de modo que: $\langle x_1, \dots, x_N | c \rangle = \Phi_c(x_1, \dots, x_N)$

$$|c\rangle \equiv |n_1, n_2, \dots\rangle \quad \text{con} \begin{cases} n_i = 0 & \text{si} \quad i \notin \{c_1, \dots, c_N\} \\ n_i = 1 & \text{si} \quad i \in \{c_1, \dots, c_N\} \end{cases}$$

Repaso de segunda cuantización

Se hace más fácil aplicar $\hat{c}_n$ y $\hat{c}_n^+$:

$$\hat{c}_k |n_1 \dots n_k \dots \rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum_{i=1}^{k-1} n_i} |n_1 \dots 0_k \dots \rangle & \text{si } n_k = 1 \\ 0 & \end{cases}$$

$$= \theta_k n_k |n_1 \dots 0_k \dots \rangle \quad \text{con } \theta_k = (-1)^{\sum_{i<k} n_i}$$

Veamos como actúa $\hat{c}_k^+$

$$\hat{c}_k^+ \Phi_c = \begin{cases} (-1)^{j-1} \Phi_{\tilde{c}} & \text{si hay } j \,/\, c_{j-1} < k < c_{j+1} \\ 0 & \text{si no} \end{cases}$$

donde $\tilde{c} = (c_1 \dots c_{j-1}\ c_k\ c_{j+1} \dots c_N)$

Repaso de segunda cuantización

Análogamente:

$$\hat{c}_k^{+} |n_1 \dots 0_k \dots\rangle = \theta_k (1-n_k) |n_1 \dots 1_k \dots\rangle \quad , \theta_k = (-1)^{\sum_{i<k} n_i}$$

El estado sin partículas se llama estado de vacío

$$\hat{c}_k |0 \dots 0 \, 1_k \, 0 \dots\rangle = |vac\rangle = |0\rangle$$

$$\hat{c}_k |0\rangle = 0$$

Creación de estados generales de N partículas:

$$|c_1 \dots c_N\rangle = \hat{c}^{+}_{c_1} \dots \hat{c}^{+}_{c_N} |0\rangle$$

Repaso de segunda cuantización

Relaciones de conmutación

$$\{\hat{c}_\ell , \hat{c}_k\} = 0$$

$$\{\hat{c}^+_\ell , \hat{c}^+_k\} = 0$$

$$\{\hat{c}^+_\ell , \hat{c}_k\} = \delta_{\ell k}$$

anticonmutadores para fermiones

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Repaso de segunda cuantización

Se demuestran fácilmente con las fórmulas anteriores.

$$\hat{c}_k \hat{c}_\ell |n_1 \cdots n_k \cdots n_\ell \cdots\rangle = \hat{c}_k \theta_\ell n_\ell |n_1 \cdots 0_\ell \cdots\rangle$$

$|n_1 \cdots 1_k \cdots 1_\ell \cdots\rangle$

(supongamos $k<\ell$) $$= \theta_\ell \theta_k n_\ell n_k |n_1 \cdots 0_k \cdots 0_\ell \cdots\rangle$$

$$\hat{c}_\ell c_k |n_1 \cdots n_k \cdots n_\ell \cdots\rangle = \hat{c}_\ell \theta_k n_k |n_1 \cdots 0_k \cdots\rangle$$

$|n_1 \cdots 1_k \; 1_\ell \cdots\rangle$

$$= -\theta_\ell \theta_k n_\ell n_k |n_1 \cdots 0_k \cdots 0_\ell \cdots\rangle$$

$$\Rightarrow \{\hat{c}_k , \hat{c}_\ell\} |n_1 \cdots\rangle = 0 \quad \forall |n_1 \cdots\rangle \Rightarrow \{\hat{c}_k , \hat{c}_\ell\} = 0$$