Mecánica Cuántica de muchas Particulas

1. Clase 1

Ejercicio 1. Sea $\hat{h}_0$ el hamiltoniano de una particula. Asumiendo que los operadores $\hat{h}_0$ actúan solo en el orbital de las variables y que tiene 3 niveles equisdistantes de energías 0, $\hbar\,\omega_0$, $2\,\hbar\,\omega_0$ (donde ω_0 es una constante real y positiva) no degenerados en el espacio orbital $\mathcal{H}_r$. En el espacio total, la degeneración de cada nivel es $2\,s+1$, donde s es el spin de la particula. Desde el punto de vista de las variables orbitales, solo interesa el subespacio $\mathcal{H}_r$ restringido a los 3 autoestados correspondientes a $\hat{h}_0$.

a) Considere un sistema de tres electrones independientes cuyo hamiltoniano puede ser escrito como

$$\hat{H} = \hat{h}_0\,(1) + \hat{h}_0\,(2) + \hat{h}_0\,(3)\,.$$

Encuente los niveles de energía de $\hat{H}$ y sus grados de degeneración.

b) Misma pregunta para un sistema de tres bosones idénticos de spin 0.

Solución. En el ítem a, como los electrones tienen spin un medio, cada nivel tiene degeneración 2. Además, como son fermiones, los autoestados del hamiltoniano $\hat{H}$ deben ser antisimétricos. Teniendo en cuenta que

$$\hat{h}_0\,|n\rangle = \hbar\,\omega_0\;\;|n\rangle\,,\;\; n=0,\;1,\;2,$$

se pueden escribir los autoestados de $\hat{H}$ de la siguiente manera

$$|\psi\rangle = \hat{A}\,|n_1,s_1\rangle \otimes |n_2,s_2\rangle \otimes |n_3,s_3\rangle\,,$$

donde $\hat{A}$ es el operador de antisimetrización. En este caso, al tratarse solo de 3 partículas, se puede escribir el estado fácilmente

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} |n_1,s_1\rangle & |n_2,s_2\rangle & |n_3,s_3\rangle \\ |n_1,s_1\rangle & |n_2,s_2\rangle & |n_3,s_3\rangle \\ |n_1,s_1\rangle & |n_2,s_2\rangle & |n_3,s_3\rangle \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}}\;\left[|n_1,s_1\rangle \otimes (|n_2,s_2\rangle \otimes |n_3,s_3\rangle - |n_3,s_3\rangle \otimes |n_2,s_2\rangle) - |n_2,s_2\rangle \otimes (|n_1,s_1\rangle \otimes |n_3,s_3\rangle - |n_3,s_3\rangle \otimes |n_1,s_1\rangle)\right.$$
$$\left. + |n_3,s_3\rangle \otimes (|n_1,s_1\rangle \otimes |n_2,s_2\rangle - |n_2,s_2\rangle \otimes |n_1,s_1\rangle)\right].$$

o bien,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\;\left[|n_1,s_1\rangle \otimes |n_2,s_2\rangle \otimes |n_3,s_3\rangle - |n_1,s_1\rangle \otimes |n_3,s_3\rangle \otimes |n_2,s_2\rangle - |n_2,s_2\rangle \otimes |n_1,s_1\rangle \otimes |n_3,s_3\rangle + |n_2,s_2\rangle \otimes |n_3,s_3\rangle \otimes |n_1,s_1\rangle\right.$$
$$\left. + |n_3,s_3\rangle \otimes |n_1,s_1\rangle \otimes |n_2,s_2\rangle - |n_3,s_3\rangle \otimes |n_2,s_2\rangle \otimes |n_1,s_1\rangle\right].$$

Se puede entonces corroborar (es más fácil hacerlo para 2 electrones) o usar directamente la expresión que se dió en la clase teórica

$$\hat{H}\,|\psi\rangle = E_{n_1 n_2 n_3}\;\;|\psi\rangle\,,$$

donde

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\,\omega_0\;\;(n_1+n_2+n_3)\,.$$

Como se trata de fermiones de spin $\frac{1}{2}$ y la función de onda es antisimétrica, el caso en el cual los 3 valores de n_i son iguales hay que descartarlo por el principio de exclusión de Pauly ya que tendría que haber dos electrones con el mismo n y el mismo spin (este caso se podría dar si por ejemplo las párticulas tuvieran spin $\frac{3}{2}$). Teniendo esto en cuenta, el estado fundamental se obtiene tomando dos de los n iguales a 0 y el restante igual a 1 dando lugar a una energía de

$$E_0 = \hbar\,\omega_0.$$

Si las particulas no fueran fermiones, cualquier autoestado del hamiltoniano correspondiente a esta energía podría escribirse como una permutación del estado

$$|0\uparrow,0\downarrow,1\uparrow\rangle = |0,\uparrow\rangle \otimes |0,\downarrow\rangle \otimes |1,\uparrow\rangle$$

o del estado

$$|0\uparrow, 0\downarrow, 1\downarrow\rangle = |0,\uparrow\rangle \otimes |0,\downarrow\rangle \otimes |1,\downarrow\rangle\,.$$

Por lo tanto habría 12 estados posibles y esta energía estaría 12 veces degenerada. Sin embargo, al tratarse de fermiones, a estos estados hay que aplicarles el operador de antisimetrización $\hat{A}$ y por lo tanto cualquier permutación entre ellos da lugar al mismo estado multiplicado por 1 o -1, pero en este último caso el estado físico sería el mismo. Por ende, la degeneración del estado fundamental es 2 y los autoestados correspondientes resultan

$$|\psi\rangle = \hat{A}\,\left\{\begin{array}{l} |0,\uparrow\rangle \otimes |0,\downarrow\rangle \otimes |1,\uparrow\rangle \\ |0,\uparrow\rangle \otimes |0,\downarrow\rangle \otimes |1,\downarrow\rangle \end{array}\right.\,.$$

El primer excitado se obtiene tomando dos de los n iguales a 0 y el restante igual a 2 o dos de los n iguales a 1 y el restante igual a 0 obteniendo

$$E_1 = 2\,\hbar\,\omega_0.$$

Usando el mismo argumento que antes se prueba que este nivel está 4 veces degenerado (ya que cada una de las dos opciones está 2 veces degenerada).

El segundo excitado se obtiene tomando todos los n distintos, es decir, uno igual a 0, otro igual a 1 y el restante igual a 2 dando lugar a una energía de

$$E_2 = 3\,\hbar\,\omega_0.$$

Como en este caso son 3 valores de n distintos, a cada uno de ellos se le puede asignar un electrón en spin $\uparrow$ o $\downarrow$ y por lo tanto resultan $2^3 = 8$ posibilidades. Luego, esta energía está 8 degenerada.

El tercer excitado se obtiene tomando dos de los n iguales a 1 y el restante igual a 2 o dos de los n iguales a 2 y el restante igual a 0 obteniendo

$$E_3 = 4\,\hbar\,\omega_0$$

y está 4 veces degenerado (mismo argumento que para el primer excitado).

Por último, el cuarto excitado se obtiene tomando dos de los n iguales a 2 y el restante igual a 1 dando lugar a

$$E_4 = 5\,\hbar\,\omega_0$$

y está 2 veces degenerado. La respuesta final es entonces que las energías del sistema están dadas por

$$E_n = (n+1)\;\hbar\,\omega_0,\;\; 0 \leq n \leq 4$$

y las degeneraciones de cada una resultan

$$g_n = \left\{\begin{array}{l} 2,\;\; n=0 \\ 4,\;\; n=1 \\ 8,\;\; n=2 \\ 4,\;\; n=3 \\ 2,\;\; n=4 \end{array}\right.\,.$$

Con todo esto queda hecho el ítem a.

En cuanto al ítem b, el procedimiento es más fácil dado que ahora no hay principio de exclusión y se elimina la degeneración de spin.

El estado fundamental se obtiene tomando todos los n iguales a 0 dando lugar a

$$E_0 = 0$$

y no está degenerado.

El primer excitado se obtiene tomando dos de los n iguales a 0 y el restante igual a 1 dando lugar a una energía de

$$E_1 = \hbar\,\omega_0$$

y tampoco está degenerado.

El segundo excitado se obtiene tomando dos de los n iguales a 0 y el restante igual a 2 o dos de los n iguales a 1 y el restante igual a 0 obteniendo

$$E_2 = 2\,\hbar\,\omega_0$$

y está 2 veces degenerado.

El tercer excitado se obtiene tomando todos los n distintos, es decir, uno igual a 0, otro igual a 1 y el restante igual a 2, o todos los n iguales a 1, dando lugar a una energía de

$$E_3 = 3\,\hbar\,\omega_0$$

y está 2 veces degenerado.

El cuarto excitado se obtiene tomando dos de los n iguales a 1 y el restante igual a 2 o dos de los n iguales a 2 y el restante igual a 0 obteniendo

$$E_4 = 4 \, \hbar \, \omega_0$$

y está 2 veces degenerado.

El quinto excitado se obtiene tomando dos de los n iguales a 2 y el restante igual a 1 dando lugar a

$$E_5 = 5 \, \hbar \, \omega_0$$

y no está degenerado.

Por último, el sexto excitado se obtiene tomando todos los n iguales a 2 dando lugar a

$$E_6 = 6 \, \hbar \, \omega_0$$

y no está degenerado.

La respuesta final es entonces que las energías del sistema están dadas por

$$E_n = n \, \hbar \, \omega_0, \; 0 \leq n \leq 6$$

y las degeneraciones de cada una resultan

$$g_n = \begin{cases} 1, & n = 0 \\ 1, & n = 1 \\ 2, & n = 2 \\ 2, & n = 3 \\ 2, & n = 4 \\ 1, & n = 5 \\ 1, & n = 6 \end{cases} .$$

Con todo esto queda hecho el ítem b.