Clase 1 - Ejercicio 3 - Cohen-Tannoudji, pp. 1450-1451

Enunciado

7. Position probability densities for a system of two identical particles

Let $|\varphi\rangle$ and $|\chi\rangle$ be two normalized orthogonal states belonging to the orbital state space $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ of an electron, and let $|+\rangle$ and $|-\rangle$ be the two eigenvectors, in the spin state space $\mathscr{E}_s$, of the S_z component of its spin.

a. Consider a system of two electrons, one in the state $|\varphi, +\rangle$ and the other, in the state $|\chi, -\rangle$. Let $\rho_{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d^3r\,d^3r'$ be the probability of finding one of them in a volume d^3r centered at point $\mathbf{r}$, and the other in a volume d^3r' centered at $\mathbf{r}'$ (two-particle density function). Similarly, let $\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r})d^3r$ be the probability of finding one of the electrons in a volume d^3r centered at point $\mathbf{r}$ (one-particule density function). Show that:

$$\rho_{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |\varphi(\mathbf{r})|^2\, |\chi(\mathbf{r}')|^2 + |\varphi(\mathbf{r}')|^2\, |\chi(\mathbf{r})|^2$$
$$\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r}) = |\varphi(\mathbf{r})|^2 + |\chi(\mathbf{r})|^2$$

Show that these expressions remain valid even if $|\varphi\rangle$ and $|\chi\rangle$ are not orthogonal in $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$.

Calculate the integrals over all space of $\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r})$ and $\rho_{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Are they equal to 1 ?

Compare these results with those which would be obtained for a system of two distinguishable particles (both spin 1/2), one in the state $|\varphi, +\rangle$ and the other in the state $|\chi, -\rangle$; the device which measures their positions is assumed to be unable to distinguish between the two particles.

b. Now assume that one electron is in the state $|\varphi, +\rangle$ and the other one, in the state $|\chi, +\rangle$. Show that we then have:

$$\rho_{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}') - \varphi(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r})|^2$$
$$\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r}) = |\varphi(\mathbf{r})|^2 + |\chi(\mathbf{r})|^2$$

Calculate the integrals over all space of $\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r})$ and $\rho_{\mathrm{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

What happens to ρ_{I} and ρ_{II} if $|\varphi\rangle$ and $|\chi\rangle$ are no longer orthogonal in $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$?

c. Same questions for two identical bosons, either in the same spin state or in two orthogonal spin states.

Propuesta

El ejercicio habla de *densidad de partículas*, pero nosotros trabajaremos con la *densidad de probabilidad* del autoestado. Ambas están relacionadas por un factor de normalización. La primera está normalizada a 1, mientras que la segunda está normalizada al número de partículas del sistema, que en este ejercicio es 2. Esto es,

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{2}\rho_{\text{II}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \tag{1}$$

Al hacer esto, estamos respondiendo de antemano la pregunta sobre la normalización... ¡Estamos haciendo trampa!

Inciso (a)

Tenemos dos fermiones, uno en el estado $|\varphi, +\rangle$ y otro en $|\chi, -\rangle$. Estos son estados del espacio producto de posición $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$ y espín $\mathcal{E}_s$. Los fermiones son indistinguibles y su función de onda total debe ser antisimétrica. El estado total es, entonces,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi, +; \chi, -\rangle - |\chi, -; \varphi, +\rangle\right). \tag{2}$$

La densidad de probabilidad la podemos calcular tomando el módulo cuadrado de $\langle \mathbf{r}, s; \mathbf{r}', s' | \psi\rangle$ e "integrando" (sumando) sobre la variable de espín, ya que se pide la densidad de partículas total. Así,

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{ss'} |\langle \mathbf{r}, s; \mathbf{r}', s' | \psi\rangle|^2 \\ &= \sum_{ss'} \frac{1}{2} \left|\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}')\langle s|+\rangle \langle s'|-\rangle - \chi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}')\langle s|-\rangle\langle s'|+\rangle\right|^2. \end{aligned} \tag{3}$$

Expandamos el cuadrado del sumando (sin el factor 1/2) y reordenemos factores,

$$\begin{aligned} &\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}')\varphi^*(\mathbf{r})\chi^*(\mathbf{r}')\,\langle s|+\rangle\,\langle +|s\rangle\,\langle s'|-\rangle\,\langle -|s'\rangle \\ -&\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}')\chi^*(\mathbf{r})\varphi^*(\mathbf{r}')\,\langle s|+\rangle\,\langle -|s\rangle\,\langle s'|-\rangle\,\langle +|s'\rangle \\ -&\varphi^*(\mathbf{r})\chi^*(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}')\,\langle s|-\rangle\,\langle +|s\rangle\,\langle s'|+\rangle\,\langle -|s'\rangle \\ +&\chi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}')\chi^*(\mathbf{r})\varphi^*(\mathbf{r}')\,\langle s|-\rangle\,\langle -|s\rangle\,\langle s'|+\rangle\,\langle +|s'\rangle \end{aligned} \tag{4}$$

Notemos que, al sumar en las variables de espín s y s', los términos cruzados (en rojo) ¡se anulan! Este resultado no depende de que φ y χ sean ortogonales, y es debido a la ortogonalidad de $|\varphi,+\rangle$ y $|\chi,-\rangle$. Por todo esto, vemos que sólo los términos directos (en negro) contribuyen a la suma,

$$P(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{2}\left(|\varphi(\mathbf{r})|^2|\chi(\mathbf{r}')|^2 + |\varphi(\mathbf{r}')|^2|\chi(\mathbf{r})|^2\right). \tag{5}$$

Notemos la simetría de este resultado respecto del intercambio $\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{r}'$. Integrando en $\mathbf{r}'$ obtenemos obtenemos $\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r})$,

$$\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\mathbf{r}'\rho_{\mathrm{II}}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = |\varphi(\mathbf{r})|^2 + |\chi(\mathbf{r})|^2; \tag{6}$$

pues, por hipótesis, $\varphi(\mathbf{r})$ y $\chi(\mathbf{r})$ están normalizados. Notemos que obtendríamos un resultado similar si integráramos en $\mathbf{r}$ e hiciésemos luego el cambio de "etiqueta" $\mathbf{r}' \to \mathbf{r}$. Intervienen los dos estados. No podemos distinguir las partículas.

Si los fermiones fueran distinguibles, podemos tomar su estado como el producto de Hartree $|\varphi,+;\chi,-\rangle$, pues la partícula "uno" está en $|\varphi,+\rangle$ y la "dos" en $|\chi,-\rangle$. La probabilidad es ahora

$$P(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{ss'} |\,\langle \mathbf{r},s;\mathbf{r}',s'|\psi\rangle\,|^2 = \sum_{ss'} |\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}')\,\langle s|+\rangle\,\langle s'|-\rangle\,|^2 = |\varphi(\mathbf{r})|^2|\chi(\mathbf{r}')|^2; \tag{7}$$

que es *uno* de los términos del caso anterior. Ahora sí se pueden distinguir las partículas por lo que no es lo mismo $\mathbf{r}$ que $\mathbf{r}'$, y la densidad de una partícula refleja esto, pues $\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r}) \not\equiv \rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r}')$, como podemos ver si integramos en $\mathbf{r}'$ y $\mathbf{r}$, respectivamente.

Inciso (b)

Ahora tenemos estados no necesariamente ortogonales, pues ambos tienen la misma proyección de espín. El estado de dos partículas indistinguibles es un triplete:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\varphi, +; \chi, +\rangle - |\chi, +; \varphi, +\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi; \chi\rangle - |\chi; \varphi\rangle) |+; +\rangle \tag{8}$$

Hagamos lo mismo que antes, calculemos la densidad de probabilidad.

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{ss'} | \langle \mathbf{r}, s; \mathbf{r}', s' | \psi \rangle |^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} |\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}') - \chi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}')|^2 \, | \langle s|+\rangle \langle s'|+\rangle |^2 \\ &= \frac{1}{2} |\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}') - \chi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}')|^2 \end{aligned} \tag{9}$$

Ahora sí importa si los estados espaciales son ortogonales o no, pues los términos de interferencia

$$\varphi^*(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}')\chi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \tag{10}$$

no se anulan idénticamente. Si integramos en $\mathbf{r}$ (o $\mathbf{r}'$) para calcular $\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r})$ (respectivamente, $\rho_{\mathrm{I}}(\mathbf{r}')$, obtenemos

$$\rho_I(\mathbf{r}) = |\varphi(\mathbf{r})|^2 + |\chi(\mathbf{r})|^2; \tag{11}$$

pues, por hipótesis, los estados φ y χ son ortogonales y por tanto los términos cruzados se anulan al integrar:

$$\int \varphi^*(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}')\chi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \; \mathrm{d}\mathbf{r}' = \chi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \int \varphi^*(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}') \; \mathrm{d}\mathbf{r}' = \chi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \langle \varphi | \chi \rangle = 0 \tag{12}$$

En el caso anterior, los estados eran “independientes” de alguna manera, y por eso tenía cierto sentido que la probabilidad resultase ser la suma simétrica la suma simetrizada ante intercambio del producto de las probabilidades $|\varphi(\mathbf{r})|^2$ y $|\chi(\mathbf{r}')|^2$. Ahora, los estados de las partículas no son “independientes” y las interferencias cuentan.

1. Inciso (c)

El caso para bosones es idéntico al anterior, sólo hay que cambiar los signos $-$ en los estados de partículas indistinguibles. Cuando estas son distinguibles, no hay cambio en la cuenta.