Clase 25 - Viernes 26/11/2021

La clase pasada vimos:

- Sistemas cuánticos de varias partículas
- Definición del problema de partículas idénticas
- Postulado de simetrización con dos partículas
- Operadores de permutación de N partículas

En esta clase veremos:

- **Kets completamente simétricos y antisimétricos**
- **Postulado de simetrización**
- **Construcción de estados**
- **Simetrización de observables**
- **Ejemplo: dos electrones**

REPASO

Definición: Partículas idénticas

Son partículas que tienen las mismas propiedades intrínsecas:

Masa, carga, espín, etc. Ejemplos: electrones, protones, neutrones.

Electrón y positrón difieren (sólo) en la carga eléctrica, no son idénticos.

Descripción matemática del estado físico con un espín **up** y otro **down**

$$\alpha \,|+,-\rangle + \beta\,|-,+\rangle \qquad\qquad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

¿Cuál estado tomamos? $\longrightarrow$ Degeneración de intercambio

REPASO

Operador Permutación: dos partículas idénticas

$$\left.\begin{aligned} P_{21}|\psi_S\rangle &= |\psi_S\rangle \\ P_{21}|\psi_A\rangle &= -|\psi_A\rangle \end{aligned}\right\}$$

Autovectores simétricos y antisimétricos
con respecto al intercambio de partículas

Operador simétrico: $[\mathcal{O}(1,2), P_{21}] = 0$

Simetrizador y antisimetrizador

$$\boxed{\begin{aligned} S &\equiv \frac{1}{2}\left(1 + P_{21}\right) \\ A &\equiv \frac{1}{2}\left(1 - P_{21}\right) \end{aligned}}$$

REPASO

Postulado de simetrización

Kets físicos

- Simétricos: bosones – espín entero
- Antisimétricos: fermiones – espín semientero

Más partículas: N=3

transposiciones

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

6 operadores de permutación

$$P_{npq}\,|\,1:u_i;\,2:u_j;\,3:u_k\,\rangle = |\,n:u_i;\,p:u_j;\,q:u_k\,\rangle$$

Kets completamente simétricos y antisimétricos

Consideremos **sistemas con N general**

Los operadores de permutación no conmutan todos entre sí	→	No hay una base de autoestados comunes

Sea $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N)$ una permutación arbitraria de $(1, 2, \ldots, N)$

Sea P_α el operador de permutación asociado:

$$P_\alpha |1 : u_{i_1}, 2 : u_{i_2}, \ldots, N : u_{i_N}\rangle = |\alpha_1 : u_{i_1}, \alpha_2 : u_{i_2}, \ldots, \alpha_N : u_{i_N}\rangle$$

Definimos kets completamente simétricos $|\psi_S\rangle$: $\Rightarrow$ $P_\alpha |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle$

Kets completamente antisimétricos $|\psi_A\rangle$:

$\Rightarrow$ $P_\alpha |\psi_A\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_A\rangle$ con $\begin{cases} \varepsilon_\alpha = +1 & \text{permutaciones pares} \\ \varepsilon_\alpha = -1 & \text{permutaciones impares} \end{cases}$

$\mathscr{E} \to \mathscr{E}_S$, $\mathscr{E}_A$ subespacios

Simetrizador y antisimetrizador

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha}$$

$$A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha}$$

$\xrightarrow{\text{proyectores en}}$ $\mathscr{E}_S$, $\mathscr{E}_A$

Propiedades

(1) S y A son hermíticos

$$S^{\dagger} = S$$
$$A^{\dagger} = A$$

$P_{\alpha}^{\dagger}$ es otro operador de permutación (más precisamente $P_{\alpha}^{\dagger} = P_{\alpha}^{-1}$)

Al sumar sobre todos ellos se obtiene la misma suma con el orden de los sumandos cambiado.

$$S = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} P_{\alpha}$$
$$A = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha}$$

Propiedades

(2) Sea P_{α_0} un operador de permutación. Entonces:

$$P_{\alpha_0} S = S P_{\alpha_0} = S$$
$$P_{\alpha_0} A = A P_{\alpha_0} = \varepsilon_{\alpha_0} A$$

Veamos:

$P_{\alpha_0} P_{\alpha} = P_{\beta}$ también es un operador de permutación, con $\varepsilon_{\beta} = \varepsilon_{\alpha_0}\varepsilon_{\alpha}$

Entonces:

$$P_{\alpha_0} S = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} P_{\alpha_0} P_{\alpha} = \frac{1}{N!}\sum_{\beta} P_{\beta} = S$$

$$P_{\alpha_0} A = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha_0} P_{\alpha} = \frac{1}{N!}\varepsilon_{\alpha_0}\sum_{\beta} \varepsilon_{\beta} P_{\beta} = \varepsilon_{\alpha_0} A$$

$$S = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha$$
$$A = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha$$

Propiedades

(3) S y A son idempotentes

$$S^2 = S$$
$$A^2 = A$$

$$S^2 = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha S = \frac{1}{N!}\sum_\alpha S = S$$

$$A^2 = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha A = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \varepsilon_\alpha^2 A = A$$

(4) Son algo así como disjuntos u ortogonales

$$AS = SA = 0$$

$$AS = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha S = \frac{1}{N!} S \sum_\alpha \varepsilon_\alpha = 0$$

(5) S y A son proyectores, proyectan sobre $\mathscr{E}_S$ and $\mathscr{E}_A$

$$P_{\alpha_0} S|\psi\rangle = S|\psi\rangle$$
$$P_{\alpha_0} A|\psi\rangle = \varepsilon_{\alpha_0} A|\psi\rangle$$

$$S = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} P_{\alpha}$$
$$A = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha}$$

Propiedades

(5) S y A son proyectores, proyectan sobre $\mathscr{E}_S$ and $\mathscr{E}_A$

$$P_{\alpha_0} S |\psi\rangle = S |\psi\rangle$$
$$P_{\alpha_0} A |\psi\rangle = \varepsilon_{\alpha_0} A |\psi\rangle$$

(6) Para N > 2, S y A no son proyectores sobre subespacios suplementarios

En otras palabras: $\mathcal{E} \neq \mathcal{E}_S \oplus \mathcal{E}_A$

Por ejemplo, para N = 3 vemos que:

$$S + A = \frac{1}{3}(P_{123} + P_{231} + P_{312}) \neq 1$$

Postulado de simetrización

Postulado de simetrización

When a system includes several identical particles, only certain kets of its state space can describe its physical states. Physical kets are, depending on the nature of the identical particles, either completely symmetric or completely antisymmetric with respect to permutation of these particles. Those particles for which the physical kets are symmetric are called *bosons*, and those for which they are antisymmetric, *fermions*.

From the point of view of this postulate, particles existing in nature are divided into two categories. All currently known particles obey the following *empirical rule**: particles of half-integral spin (electrons, positrons, protons, neutrons, muons, etc.) are fermions, and particles of integral spin (photons, mesons, etc.) are bosons.

* The "spin-statistics theorem", proven in quantum field theory, makes it possible to consider this rule to be a consequence of very general hypotheses. However, these hypotheses may not all be correct, and discovery of a boson of half-integral spin or a fermion of integral spin remains possible. It is not inconceivable that, for certain particles, the physical kets might have more complex symmetry properties than those envisaged here.

Postulado de simetrización

Simetría de partículas elementales y compuestas

El postulado de simetrización elimina la degeneración de intercambio

Construcción de estados

Construcción de estados de partículas idénticas

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + u(x_i) \right) \qquad x = (\mathbf{r}, s)$$

Primero resolvemos el problema de una partícula:

$$\hat{h}\phi_\nu(x) = \varepsilon_\nu \phi_\nu(x) \quad \Longrightarrow \quad \{\phi_\nu\} \text{ base de "orbitales" } \phi_\nu$$

Ejemplo: $u(x) = -\dfrac{Ze^2}{r} \quad \Longrightarrow \quad \nu = (n, \ell, m, m_s)$

Receta:

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

(2) Aplicar S o A

(3) Normalizar

Bosones

normalización

$$\phi^{(S)} = C \sum_{\alpha} P_{\alpha}[\phi_{\nu_1}(x_1)\ldots\phi_{\nu_N}(x_N)]$$

Normalización C

Si todos los ν_i son iguales: $\sum_{\alpha} P_{\alpha}[\phi_{\nu}(x_1)\ldots\phi_{\nu}(x_N)] = N!\,\phi_{\nu}(x_1)\ldots\phi_{\nu}(x_N)$

$\Longrightarrow$ se divide por $N! \Longrightarrow C = \dfrac{1}{N!}$

Si todos los ν_i son distintos, hay $N!$ sumandos y se normaliza con $\dfrac{1}{\sqrt{N!}}$

En general: $\dfrac{1}{\sqrt{N!}\sqrt{\Pi_k n_k!}}$

k: indice de orbitales distintos

n_k: número de partículas en *k*

Fermiones

$$\phi^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha} sgn(P_\alpha) P_\alpha [\phi_{\nu_1}(x_1) \dots \phi_{\nu_N}(x_N)]$$

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

Determinante de Slater

Notar que si: $\nu_i = \nu_j \Longrightarrow \phi^{(A)} = 0$

Principio de exclusión de Pauli

Los estados simetrizados son autoestados de H_0

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

$$= \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{\nu_i}\right)}_{\text{Autovalor E total}}\phi^{(S/A)}(x_1,\ldots,x_N)$$

Ejercicio: demostrarlo explícitamente para $N = 2$ $(\nu_1 \neq \nu_2)$ donde $H_0 = \hat{h}_1 + \hat{h}_2$

Simetrización de observables

Los observables asociados a cantidades físicas tienen que involucrar a las N partículas simétricamente

$$\mathbf{R}_G = \frac{1}{3}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_3)$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_3$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_3$$

$$W = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1|}\right)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$$

$$[G, P_\alpha] = 0 \quad \text{for all} \quad P_\alpha$$

Ejemplo: dos electrones

Habíamos hecho la suma de dos espines ½ :

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+,-\rangle - |-,+\rangle\right]$$

singlete

$$\begin{cases} |1,1\rangle = |+,+\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+,-\rangle + |-,+\rangle\right] \\ |1,-1\rangle = |-,-\rangle \end{cases}$$

triplete

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle$$

Debe ser antisimétrico frente al intercambio de partículas

$$|\psi\rangle = (|1:u_i, 2:u_j\rangle \pm |1:u_j, 2:u_i\rangle) \otimes |S,M\rangle$$

Ejemplo: dos electrones

Physica E 41 (2009) 1577–1582

Contents lists available at ScienceDirect

Physica E

journal homepage: www.elsevier.com/locate/physe

Spin–orbit effects on two-electron states in nanowhisker double quantum dots

C.L. Romano[a], P.I. Tamborenea[a,*], S.E. Ulloa[b]

[a] Department of Physics "J.J. Giambiagi", University of Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellón I, C1428EHA Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina
[b] Department of Physics and Astronomy, Nanoscale and Quantum Phenomena Institute, Ohio University, Athens, Ohio 45701-2979, USA

$$H = H_1^0 + H_2^0 + H_{1dR} + V_{int},$$

$$H_{1dR} = \sum_{i=1}^{2} \frac{\gamma_R}{\hbar} \left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle p_{z,i}(\sigma_{x_i} - \sigma_{y_i}),$$

$$V_{int}(|z_2 - z_1|) = \int dx_1\, dx_2\, dy_1\, dy_2 \times \frac{e^2 \Phi(x_1)^2 \Phi(x_2)^2 \Phi(y_1)^2 \Phi(y_2)^2}{\varepsilon \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}},$$

$$\psi_i = \sum_{j=1}^{28} a_{ij} \varphi_j,$$

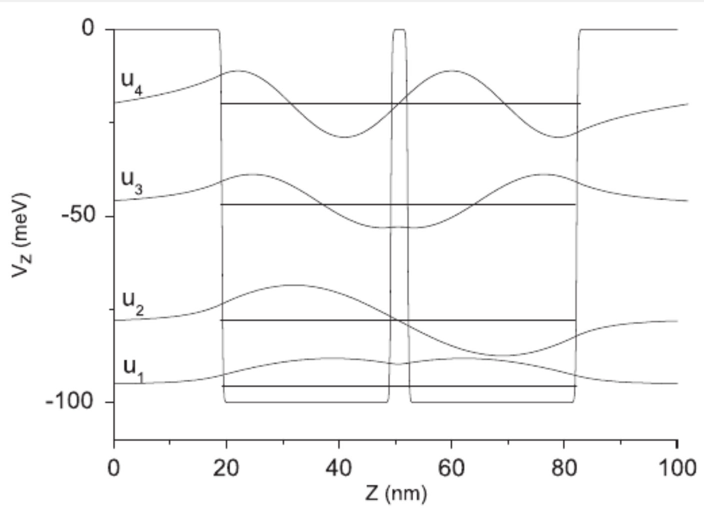

Fig. 1. The $Al_{0.1}In_{0.9}Sb$–InSb double-well confining potential in the longitudinal direction of the quasi-one-dimensional nanowhisker quantum dots. The single-particle eigenfunctions and energies are also shown.

As a basis set for the two-electron Hilbert space we take all the u_n $(n = 1, 4)$ which gives 28 two-particle basis states:

$$\begin{aligned}
\varphi_i &= u_i(z_1)u_i(z_2)|0,0\rangle, \\
\varphi_{j+3} &= (1/\sqrt{2})[u_1(z_1)u_j(z_2) + u_j(z_1)u_1(z_2)]|0,0\rangle, \\
\varphi_{k+5} &= (1/\sqrt{2})[u_2(z_1)u_k(z_2) + u_k(z_1)u_2(z_2)]|0,0\rangle, \\
\varphi_{10} &= (1/\sqrt{2})[u_3(z_1)u_4(z_2) + u_4(z_1)u_3(z_2)]|0,0\rangle, \\
\varphi_{l+9} &= (1/\sqrt{2})[u_1(z_1)u_l(z_2) - u_l(z_1)u_1(z_2)]|1,1\rangle, \\
\varphi_{l+12} &= (1/\sqrt{2})[u_1(z_1)u_l(z_2) - u_l(z_1)u_1(z_2)]|1,-1\rangle, \\
\varphi_{l+15} &= (1/\sqrt{2})[u_1(z_1)u_l(z_2) - u_l(z_1)u_1(z_2)]|1,0\rangle, \\
\varphi_{m+17} &= (1/\sqrt{2})[u_2(z_1)u_m(z_2) - u_m(z_1)u_2(z_2)]|1,1\rangle, \\
\varphi_{m+19} &= (1/\sqrt{2})[u_2(z_1)u_m(z_2) - u_m(z_1)u_2(z_2)]|1,-1\rangle, \\
\varphi_{m+21} &= (1/\sqrt{2})[u_2(z_1)u_m(z_2) - u_m(z_1)u_2(z_2)]|1,0\rangle, \\
\varphi_{26} &= (1/\sqrt{2})[u_3(z_1)u_4(z_2) - u_4(z_1)u_3(z_2)]|1,1\rangle, \\
\varphi_{27} &= (1/\sqrt{2})[u_3(z_1)u_4(z_2) - u_4(z_1)u_3(z_2)]|1,-1\rangle, \\
\varphi_{28} &= (1/\sqrt{2})[u_3(z_1)u_4(z_2) - u_4(z_1)u_3(z_2)]|1,0\rangle,
\end{aligned} \tag{4}$$

Resumen de la Clase 25

En esta clase vimos:

- Kets completamente simétricos y antisimétricos
- Postulado de simetrización
- Construcción de estados
- Simetrización de observables
- Ejemplo: dos electrones