

Partículas idénticas

Consideremos el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ de un sistema compuesto de 2 partículas.

El ket $|a\rangle|b\rangle = |ab\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ representa

- la partícula “1” en el estado $|a\rangle$
- la partícula “2” en el estado $|b\rangle$

Por otro lado el ket $|b\rangle|a\rangle = |ba\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ representa

- la partícula “1” en el estado $|b\rangle$
- la partícula “2” en el estado $|a\rangle$

¿Qué pasa si “1” y “2” son partículas idénticas, dos electrones por ejemplo?

Los kets $|ab\rangle$ y $|ba\rangle$ representan

- un electrón en el estado $|a\rangle$
- un electrón en el estado $|b\rangle$

Son el mismo estado físico, no hay ningún observable que los pueda diferenciar.

Para partículas idénticas, el espacio producto $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ es “demasiado grande”.

Operador intercambio

Se define en $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ el operador intercambio de partículas

$$P_{12} |ab\rangle = |ba\rangle$$

Propiedades :

$$\square P_{12}^{-1} = P_{12}$$

$$P_{12}^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad P_{12}^{-1} = P_{12}$$

$$\square P_{12}^\dagger = P_{12}$$

$$\langle ab | P_{12} | cd \rangle = \langle ab | dc \rangle = \delta_{ad} \delta_{bc}$$

$$\langle ab | P_{12}^\dagger | cd \rangle = \langle cd | P_{12} | ab \rangle^* = \langle cd | ba \rangle^* = \delta_{cb} \delta_{ad}$$

$$\square P_{12}^\dagger = P_{12}^{-1}$$

$$\left. \begin{array}{l} P_{12}^{-1} = P_{12} \\ P_{12}^\dagger = P_{12} \end{array} \right\} P_{12}^\dagger = P_{12}^{-1}$$

Operador intercambio y partículas idénticas

Pedimos que los kets en $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ que describen dos partículas idénticas sean invariantes ante el intercambio de ellas :

$$P_{12} |\psi\rangle = \eta |\psi\rangle$$

Aplicando P_{12} de nuevo :

$$\left. \begin{array}{l} P_{12}^2 |\psi\rangle = \eta^2 |\psi\rangle \\ P_{12}^2 = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \eta^2 = 1 \Rightarrow \eta = \pm 1$$

Las dos posibilidades de η ocurren en la naturaleza, según su espín

Simétrico : $P_{12} |\psi_S\rangle = +|\psi_S\rangle$ (bosones: espín entero)

Antisimétrico : $P_{12} |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle$ (fermiones: espín semientero)

Descomposición de $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ en $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_A$

Definimos el simetrizador S y el antisimetrizador A :

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{12}) \quad A = \frac{1}{2}(1 - P_{12})$$

cuyas propiedades son:

$$S^2 = S \quad A^2 = A \quad SA = 0 \quad S + A = 1 \quad P_{12}S = S \quad P_{12}A = -A$$

S y A son proyectores sobre subespacios disjuntos, \mathcal{H}_S y \mathcal{H}_A , cuya suma es \mathcal{H} :

$$P_{12} [S|\psi\rangle] = +[S|\psi\rangle] \quad \Rightarrow \quad S|\psi\rangle \text{ es un } |\psi_S\rangle$$

$$P_{12} [A|\psi\rangle] = -[A|\psi\rangle] \quad \Rightarrow \quad A|\psi\rangle \text{ es un } |\psi_A\rangle$$

S y A asignan unívocamente un ket de \mathcal{H} al estado de partículas idénticas:

$$|\psi_S\rangle \propto S|ab\rangle = \frac{1}{2}(|ab\rangle + |ba\rangle) \quad P_{12}|\psi_S\rangle = +|\psi_S\rangle \quad (\text{bosones})$$

$$|\psi_A\rangle \propto A|ab\rangle = \frac{1}{2}(|ab\rangle - |ba\rangle) \quad P_{12}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \quad (\text{fermiones})$$

Ejemplo 1: Niveles rotacionales de moléculas diatómicas

Sistema de dos partículas (núcleos) separados una distancia a fija. Definiendo:

$$\mathbf{R}_{\text{cm}} = \frac{m_1 \mathbf{R}_1 + m_2 \mathbf{R}_2}{m_1 + m_2} \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1 \quad M = m_1 + m_2 \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \mathbf{P}_{\text{cm}} = M \dot{\mathbf{R}}_{\text{cm}} \quad \mathbf{P} = \mu \dot{\mathbf{R}}$$

el Hamiltoniano del sistema se descompone en dos términos:

- ⇨ Energía cinética de una masa M que se mueve libremente
- ⇨ Energía cinética de una masa μ ubicada en \mathbf{R} (sujeta a $|\mathbf{R}| = a$)

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{p_{\text{cm}}^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} \quad H_{\text{rot}} = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{L^2}{2\mu a^2} = \frac{L^2}{2\mathcal{I}} \quad H_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2\mathcal{I}}$$

donde \mathcal{I} es el momento de inercia de la molécula respecto a su CM.

Los autovalores de la energía (niveles rotacionales) son

$$E = \frac{L^2}{2\mathcal{I}} = \frac{\ell(\ell+1) \hbar^2}{2\mathcal{I}} = (0, 1, 3, 6, 10, 15, 21, 28, 36, 45, \dots) \frac{\hbar^2}{\mathcal{I}}$$

y los autoestados $|\ell m\rangle$: $\langle \mathbf{r} | \ell m \rangle = Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

Moléculas diatómicas homonucleares

La operación intercambio de núcleos en la molécula diatómica es

$$\begin{array}{lcl} P_{12} \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 & \implies & P_{12} \mathbf{r}_{\text{cm}} = +\mathbf{r}_{\text{cm}} \\ P_{12} \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 & & P_{12} \mathbf{r} = -\mathbf{r} \end{array}$$

Por lo tanto P_{12} corresponde a Π , el operador paridad en H_{rot} : $P_{12} = \Pi$

Los autoestados $|\ell m\rangle$ tienen paridad definida \Rightarrow son autoestados de P_{12} :

$$\Pi Y_{\ell m} = (-1)^\ell Y_{\ell m} \quad \implies \quad P_{12} Y_{\ell m} = (-1)^\ell Y_{\ell m}$$

⇒ Las moléculas diatómicas homonucleares tiene simetría definida ante intercambio.

Moléculas diatómicas homonucleares: bosones

Ejemplo: $C^{12} - C^{12}$

La función de onda tiene que ser par ante el intercambio $P_{12} \Rightarrow \ell$ par

$$E = \frac{L^2}{2\mathcal{I}} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mathcal{I}} = (0, \cancel{1}, 3, \cancel{6}, 10, \cancel{15}, 21, \cancel{28}, 36, \cancel{45}, \dots) \frac{\hbar^2}{\mathcal{I}}$$

Prohibidos los ℓ impares \Rightarrow faltan la mitad de los niveles!

Si en vez de $C^{12} - C^{12}$ tuvieramos la molécula $C^{12} - C^{13}$, reaparecen todos los niveles.

Moléculas diatómicas homonucleares: fermiones

Ejemplo: H – H

Hay que considerar el grado de libertad de espín de los protones, degeneración 4.
Se divide en singlete $S=0$ (antisimétrico) y triplete $S=1$ (simétrico).

$$S=0 \Rightarrow \ell \text{ par (parahidrógeno)} \quad E = (0, \cancel{1}, 3, \cancel{6}, 10, \cancel{15}, 21, \cancel{28}, 36, \cancel{45}, \dots) \frac{\hbar^2}{\mathcal{I}}$$

$$S=1 \Rightarrow \ell \text{ impar (ortohidrógeno)} \quad E = (\cancel{0}, 1, \cancel{3}, \cancel{6}, \cancel{10}, 15, \cancel{21}, \cancel{28}, \cancel{36}, 45, \dots) \frac{\hbar^2}{\mathcal{I}}$$

A temperatura ambiente ($kT \gg E$) es $3/4$ orto y $1/4$ para.

A baja temperatura domina el estado para (99.95% $\ell=0$ a 20 K) pese a que el Hamiltoniano es independiente del espín (y de hecho la interacción magnética prefiere espines paralelos).

El calor específico depende del cociente orto/para.

La proporción de niveles (y el espectro) del H_2 cambia al enfriar la muestra.

Scattering de partículas distinguibles: $|p_a p_b\rangle \longrightarrow |k_a k_b\rangle$

En el sistema CM dos partículas entrantes con impulso lineal p_a y p_b ($p_b = -p_a$) chocan y salen con momentos k_a y k_b ($k_b = -k_a$).

El estado inicial es $|p_a p_b\rangle$ y el estado final puede ser $|k_a k_b\rangle$ o $|k_b k_a\rangle$, (el primer índice corresponde a la partícula 1 y el segundo a la partícula 2).

La amplitud de scattering se calcula con el operador evolución

$$\langle k_a k_b | U_T | p_a p_b \rangle = f(\theta)$$

$$\langle k_b k_a | U_T | p_a p_b \rangle = f(\pi - \theta)$$

Si los detectores no identifican el tipo de partícula, la probabilidad de scattering a un ángulo θ es

$$P(\theta) = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2$$

Scattering de partículas idénticas: $|\psi_i\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$

Es necesario simetrizar o antisimetrizar el estado inicial y el final ($\varepsilon = \pm 1$):

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \varepsilon P_{12}) |p_a p_b\rangle$$

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \varepsilon P_{12}) |k_a k_b\rangle$$

La amplitud de scattering es:

$$\begin{aligned}\langle \psi_f | U_T | \psi_i \rangle &= \frac{1}{2} \langle k_a k_b | (1 + \varepsilon P_{12}) U_T (1 + \varepsilon P_{12}) | p_a p_b \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle k_a k_b | (1 + \varepsilon P_{12}) (1 + \varepsilon P_{12}) U_T | p_a p_b \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle k_a k_b | 2(1 + \varepsilon P_{12}) U_T | p_a p_b \rangle \\ &= (\langle k_a k_b | + \varepsilon \langle k_b k_a |) U_T | p_a p_b \rangle \\ &= \underbrace{\langle k_a k_b | U_T | p_a p_b \rangle}_{f(\theta)} + \varepsilon \underbrace{\langle k_b k_a | U_T | p_a p_b \rangle}_{f(\pi - \theta)}\end{aligned}$$

$$P(\theta) = |f(\theta) + \varepsilon f(\pi - \theta)|^2$$

Condensación de Bose y Exclusión de Pauli

Sea $|\psi\rangle$ un estado de dos partículas distinguibles con $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi \rangle$

La proba de encontrar ambas en la misma posición es $|\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2$.

Si las partículas son indistinguibles, la función de onda es $\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ o $\psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$:

$$\psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi_S \rangle = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | S | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | + \langle \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 |) | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)]$$

$$\psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi_A \rangle = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | A | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | - \langle \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 |) | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)]$$

¿Cuál es la probabilidad de encontrar ambas partículas en la misma posición?

distinguibles: $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2$

bosones: $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = 2 |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2$

fermiones: $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = 0$

Tres o más partículas idénticas

Si $\{|i\rangle\}$ es una base del \mathcal{H} de una partícula, para tres partículas distinguibles una base de \mathcal{H}_3 es $\{|ijk\rangle\}$.

Definimos operadores de intercambio y permutaciones en \mathcal{H}_3 :

- $n(n-1)/2$ operadores de intercambio, $P_{12}, P_{13}, P_{23} : P_{13}|abc\rangle = |cba\rangle$
- $n!$ permutaciones P_{ijk} que reordenan las partículas : $P_{231}|abc\rangle = |cab\rangle$

Las permutaciones se pueden poner como productos de intercambios :

$$\begin{array}{lll} P_{123} = 1 & P_{231} = P_{12}P_{23} & P_{312} = P_{23}P_{12} \\ P_{132} = P_{23} & P_{213} = P_{12} & P_{321} = P_{13} \end{array}$$

Las permutaciones se denominan “pares” o “impares” según el número de intercambios que requieran. Para $n=3$:

$$\begin{array}{lll} P_{123} & P_{231} & P_{312} & \text{(pares)} \\ P_{132} & P_{213} & P_{321} & \text{(impares)} \end{array}$$

Tres o más partículas idénticas

Pedimos que los kets que describen estados de partículas idénticas sean invariantes ante intercambios

$$\forall ij : \quad \begin{array}{ll} P_{ij} |\psi_S\rangle = +|\psi_S\rangle & |\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S : \text{ ket simétrico, bosones} \\ P_{ij} |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle & |\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A : \text{ ket antisimétrico, fermiones} \end{array}$$

Definimos el simetrizador y el antisimetrizador

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

donde ε_{α} es la paridad de la permutación P_{α} . Demostrar:

$$S^2 = S \quad A^2 = A \quad SA = 0 \quad S + A < 1 \quad P_{\alpha} S = S \quad P_{\alpha} A = \varepsilon_{\alpha} A$$

Esto implica que

$$S|\psi\rangle \in \mathcal{H}_S \quad A|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \quad \mathbf{y} \quad \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_A < \mathcal{H}_n$$

Sistemas de “partícula independiente” para fermiones

Para n partículas distinguibles, la aproximación de partícula independiente consiste en hacer un producto de funciones unidimensionales, p.ej. :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5) = \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) \varphi_c(\mathbf{r}_3) \varphi_d(\mathbf{r}_4) \varphi_e(\mathbf{r}_5)$$

Para partículas idénticas fermiones, el postulado de antisimetrización requiere

$$\Psi_A \propto A \Psi = \frac{1}{5!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) \varphi_c(\mathbf{r}_3) \varphi_d(\mathbf{r}_4) \varphi_e(\mathbf{r}_5)$$

donde el antisimetrizador no es más que la definición de determinante:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5) = \frac{1}{\sqrt{5!}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1) & \varphi_c(\mathbf{r}_1) & \varphi_d(\mathbf{r}_1) & \varphi_e(\mathbf{r}_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2) & \varphi_c(\mathbf{r}_2) & \varphi_d(\mathbf{r}_2) & \varphi_e(\mathbf{r}_2) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_3) & \varphi_b(\mathbf{r}_3) & \varphi_c(\mathbf{r}_3) & \varphi_d(\mathbf{r}_3) & \varphi_e(\mathbf{r}_3) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_4) & \varphi_b(\mathbf{r}_4) & \varphi_c(\mathbf{r}_4) & \varphi_d(\mathbf{r}_4) & \varphi_e(\mathbf{r}_4) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_5) & \varphi_b(\mathbf{r}_5) & \varphi_c(\mathbf{r}_5) & \varphi_d(\mathbf{r}_5) & \varphi_e(\mathbf{r}_5) \end{vmatrix}$$

Si dos estados o dos posiciones son iguales ($\varphi_b = \varphi_d$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_5$), el determinante se anula