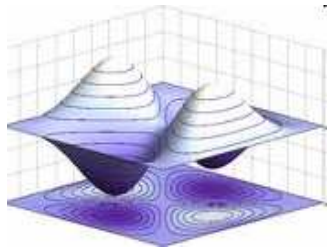
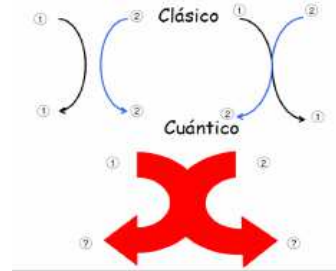


Partículas idénticas



Partículas idénticas

Que pasa cuando describimos sistemas de mas de una partícula.



Dos partículas sin interacción

Son dos partículas idénticas igual masa, carga etc.

Clásicamente

$$\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V_1(x) + V_2(x) = E$$

Supongamos que podemos describir las dos partículas juntas por una Ψ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \Psi + V_1(x) \Psi + V_2(x) \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

Esto es susceptible de ser separado

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t)$$

resultando en la ecuación

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) \\
 &\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) \\
 &\quad + V_1(x_1) \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) \\
 &\quad + V_2(x_2) \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) \right. \\
 &\quad \left. + V_1(x_1) \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) \right] \\
 &\quad + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) \right. \\
 &\quad \left. + V_2(x_2) \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot f(t) \right]
 \end{aligned}$$

$$i\hbar \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot \frac{\partial}{\partial t} f(t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi_A(x_1) + V_1(x_1) \psi_A(x_1) \right] \psi_B(x_2) \cdot f(t) + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \psi_B(x_2) + V_2(x_2) \psi_B(x_2) \right] \psi_A(x_1) \cdot f(t)$$

$$\Rightarrow (E_A + E_B) f = i\hbar \frac{df}{dt}$$

Luego podemos hacer

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi_A(x_1) + V_1(x_1) \psi_A(x_1) = E_A \psi_A(x_1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \psi_B(x_2) + V_2(x_2) \psi_B(x_2) = E_B \psi_B(x_2)$$

Con $E = E_A + E_B$

Lo que da lugar a soluciones

$$(E_A + E_B) f = i\hbar \frac{\partial f}{\partial t}$$

Resultara entonces

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \exp(-iEt/\hbar)$$

Con $E_A + E_B = E$

Respecto de la probabilidad es inmediato que

$$dP = |\Psi|^2 dx_1 dx_2 = |\psi_A(x_1)|^2 dx_1 \cdot |\psi_B(x_2)|^2 dx_2$$

Esto expresa la proba de tener la partícula 1 en x_1 , en un intervalo dx_1 ...

Las Particulas son identicas!!!!!!

Si quisiesemos identificar las cosas, 1 denota la posicion x_1 pero no sabemos que partícula esta allí

(cual) $\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2)$ No se distingue de $\psi_A(x_2) \cdot \psi_B(x_1)$

Sean las conjuntas para los dos estados mas bajos en una caja de lado L

Supongamos

$$\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \sim \sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right)$$

repetiendo

$$\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \sim \sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right)$$

$$\psi_A(x_2) \cdot \psi_B(x_1) \sim \sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right)$$

Esto resulta en

$\Psi_A \cdot \Psi_B$

Lineas $\Psi_A \cdot \Psi_B = \text{cte}$

Estas "colinas" corresponden a las dos elecciones de la partícula 1 y 2 o sea que las podemos reconocer, pero pensamos en indistinguibles

si por el contrario tomo

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) + \psi_A(x_2) \cdot \psi_B(x_1))$$

$\equiv \Psi_s$ simétrica

y

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) - \psi_A(x_2) \cdot \psi_B(x_1))$$

$\equiv \Psi_a$ antisimétrica

simétrica

antisimétrica

$\Psi_s = \Psi_s$

$\Psi_a = \Psi_a$

Si intercambiamos 1 con 2
No hay modificaciones

Si intercambiamos 1 con 2
hay cambio de signo.

simétrica

antisimétrica

Observar que los máximos para la simétrica se producen cuando $x_1 = x_2$

Para la antisimétrica, por el contrario, el máximo es cuando $x_1 \neq x_2$

Sugiere esto que la simétricas se "atraen" y las antisimétricas se "repelen" sin que haya potencial de interacción real!

Cuales son unas u otras?

Sean partículas distinguibles con funciones ortogonales y normalizadas

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$$

Sean dos simétricas o dos antisimétricas idénticas

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]$$

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]$$

Se calcula la "separación" media de las partículas

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle$$

Distinguibles

$$\langle x_1^2 \rangle = \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_a$$

$$\langle x_2^2 \rangle = \int |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2^2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_b$$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

Entonces

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_a = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

Para las simetrizadas

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\ &+ \int x_1^2 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\ &\pm \int x_1^2 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\ &\left. \pm \int x_1^2 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \end{aligned}$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \frac{1}{2} [\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b \pm 0 \pm 0] = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b)$$

De la misma forma

$$\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_b + \langle x^2 \rangle_a)$$

Para el otro termino

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\ &+ \int x_1 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\ &\pm \int x_1 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\ &\left. \pm \int x_1 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \\ &= \frac{1}{2} (\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b + \langle x \rangle_b \langle x \rangle_a \pm \langle x \rangle_{ab} \langle x \rangle_{ba} \pm \langle x \rangle_{ba} \langle x \rangle_{ab}) \end{aligned}$$

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \pm |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

$$\langle x \rangle_{ab} \equiv \int x \psi_a(x)^* \psi_b(x) dx$$

Entonces

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\pm} = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_{\pm} = \langle (\Delta x)^2 \rangle_d \mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2$$

Las simétricas tienden a estar mas cerca

Estados de spin para dos partículas

Supongamos que tenemos dos electrones con spin para arriba (α) o para abajo (β) entonces podemos tener las combinaciones

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha(1)\alpha(2) \\ \alpha(1)\beta(2) \\ \alpha(2)\beta(1) \\ \beta(2)\beta(1) \end{array} \right.$$

Con esto tenemos las posibilidades

| Simétricas | Antisimétricas |
|---|---|
| $\alpha(1)\alpha(2)$ | $\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)]$ |
| $\beta(1)\beta(2)$ | |
| $\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)]$ | S_z corresponde a 0 |
| S_z corresponde a 1, -1 y 0 | |

Lo que corresponde a un estado de spin $S = 1$ y a un estado de spin $S = 0$

Simetría de intercambio y ppo. de Pauli

Esto se puede resumir en la existencia de un operador P de permutación :

Sea

$$\Psi = \Psi(r_1s_1, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_n s_n, t)$$

Sea un operador P_{ij}

$$P_{ij}\Psi(r_1s_1, \dots, r_i s_i, \dots, r_j s_j, \dots, r_n s_n, t)$$

resulta en

$$\lambda\Psi(r_1s_1, \dots, r_j s_j, \dots, r_i s_i, \dots, r_n s_n, t)$$

Donde i, j denotan las "posiciones en Ψ "

Entonces

$$P_{ij}P_{ij}\Psi = P_{ij}^2\Psi = \lambda^2\Psi = \Psi \Rightarrow$$
$$\lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

Las funciones son entonces tales que

$$P_{ij}\Psi = \Psi$$
$$P_{ij}\Psi = -\Psi$$

Es interesante ver que

Entonces

$$V(r_1s_1, \dots, r_1s_1, \dots, r_1s_1, \dots, r_n s_n, t)$$
$$=$$
$$V(r_1s_1, \dots, r_1s_1, \dots, r_1s_1, \dots, r_n s_n, t)$$

$$\Psi_s V \Psi_a = 0$$

y entonces no hay transiciones de un estado al otro para un $-V(r\dots)$

Por otro lado

$$V(x_1, x_2) = V(x_2, x_1)$$

Entonces

$$[P, H] = 0$$

Entonces tienen un sistema de autofunciones comunes

Partículas con spin intrínseco

| Spin semientero | Spin entero o 0 |
|-----------------|-----------------|
| electron | meson pi |
| proton | α |
| neutron | He_4 |
| He_3 | deuteron |

Para las partículas de spin semientero, solo se encuentran en la naturaleza son funciones de onda antisimétricas

Para las otras las funciones de onda son simétricas

Pauli descubrió en 1924 que dos electrones no podían tener los mismos números cuánticos

Estas propiedades dan lugar a el así llamado ppo. de exclusión

Cuando dos partículas van a "sentir" el ppo de exclusión?

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \pm \psi_A(x_2) \cdot \psi_B(x_1))$$

$$|\Psi(x_1, x_2)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_A(x_1) \cdot \psi_B(x_2)|^2 + \frac{1}{2} |\psi_B(x_1) \cdot \psi_A(x_2)|^2 \pm \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} \psi_A^*(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \cdot \psi_B^*(x_1) \cdot \psi_A(x_2) + \\ \psi_B^*(x_1) \cdot \psi_A(x_2) \cdot \psi_A^*(x_1) \cdot \psi_B(x_2) \end{array} \right\}$$

Ambas partículas aparecen asociadas a las Dos funciones de onda

El término entre llaves da idea de la superposición de los paquetes que representan a las partículas

Que pasa cuando $x_1 \rightarrow x_2$?

A system containing several electrons must be described by an antisymmetric eigenfunction.

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) \\ \psi_\beta(1) & \psi_\beta(2) \end{pmatrix}$$

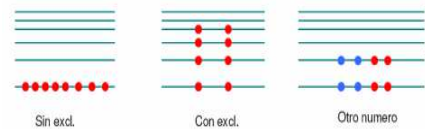
Determinante
Discriminante

En general

$$\psi_A = \frac{1}{2\sqrt{N!}} \begin{pmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\alpha(2) & \dots & \psi_\alpha(N) \\ \psi_\beta(1) & & & \\ \dots & & & \\ \psi_\nu(1) & & & \psi_\nu(N) \end{pmatrix}$$

y esto es el determinante de Slater, tomar en cuenta que el determinante se anula si tiene dos columnas iguales

Fermiones



Singlete y Triplete

Sea la funcion de onda "de partida"

$$\psi_{\alpha\beta} = \psi_{\alpha}(1)\psi_{\beta}(2) = \psi_{\alpha}(1)\psi_{\beta}(2)\sigma_{m_{z_1}}(1)\sigma_{m_{z_2}}(2)$$

Las funciones de onda de spin posibles son

$$\sigma_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \quad \sigma_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}} \quad \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{1}{2}} \quad \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{-1}{2}}$$

Se pueden construir las siguientes combinaciones

Antisimetrica:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}} - \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{1}{2}})$$

singlete

Simetrica

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}} + \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{1}{2}}) \\ \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{-1}{2}} \end{array} \right.$$

triplete

Pero si estamos lidiando con fermiones

la antisimetrica de spin debe ser multiplicada por una simetrica de "coordenadas"

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} + \psi_{ba})$$

Mientras que las triplete deben ser multiplicadas por antisimetricas

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba})$$

Resulta entonces que las funciones de onda aceptables para dos particulas fermionicas no interactuantes resultan ser

$$\psi \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} + \psi_{ba}) \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}} - \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{1}{2}}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba}) \sigma_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba}) \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{\frac{1}{2}\frac{-1}{2}} + \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{1}{2}}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{ab} - \psi_{ba}) \sigma_{\frac{-1}{2}\frac{-1}{2}} \end{array} \right.$$

Para interpretar esto correctamente es apropiado calcular el momento angular de spin total del sistema

$$S' = S_1 + S_2$$

podemos aceptar que como se trata de 2 momentos angulares vale

$$S' = \sqrt{s'(s'+1)} \hbar$$

$$S'_z = m'_s \hbar$$

$$m'_s = -s', \dots, +s'$$

$$s' = 0, 1$$

O sea que

TABLE (12-1)
Quantum Numbers for the Singlet and Triplet States

| Spin eigenfunction | Designation | s' | m'_s |
|---|-------------|------|--------|
| $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}})$ | singlet | 0 | 0 |
| $\sigma_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}$ | triplet | 1 | +1 |
| $\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \sigma_{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}})$ | triplet | 1 | 0 |
| $\sigma_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$ | triplet | 1 | -1 |