PARTÍCULAS IDÉNTICAS

· Analizaremos sistemas de varias partículas, para luego estudiar las partículas idénticas.

· El estado cuántico es $|\psi\rangle$ que, en representación de coordenadas, se escribe:

$$\langle \vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N)$$ (hay una función de onda, no N)

y el Hamiltoniano:

para no contar 2 veces

$$\boxed{H = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{p_i^2}{2m_i} + V_i(\vec{r})\right] + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} V'(\vec{r}_i, \vec{r}_j)}$$

Potencial de interacción

· Se denomina aproximación de orden 0 a la que desprecia la interacción entre partículas: $\underline{V'=0}$

En ese caso, $H = \sum_{i=1}^{N} H_i$; y los autoestados se pueden poner como productos de autoestados:

$$\psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_n) = \psi_1(\vec{r}_1) \ldots \psi_N(\vec{r}_N)$$

Con
$$H\psi = E\psi$$
$$H_i\psi_i = E_i\psi_i \quad (E = \sum E_i)$$

(esto se puede hacer porque si luego $H_i(\psi_i\psi_j) \underset{\substack{H_i \text{ es función}\\ \text{de } \vec{r}_i}}{=} \psi_j H \psi_i = \psi_j E_i \psi_i = E_i \psi_i \psi_j$. Si luego para todos los Hamiltonianos con ψ, queda $\sum_i H_i \psi_1 \ldots \psi_N = (E_1 + \ldots + E_N)\psi_1 \ldots \psi_N$ (C.Q.D.)

· En general, el autoestado de un sistema de N partículas se puede construir con el producto tensorial de cada uno de los autoestados; siendo la energía la suma.

Se puede incluir ψ

· Supongamos que las partículas i y j son idénticas (p.ej.: electrones). Intercambiar las funciones no varía el estado cuántico pero sí la función de onda: degeneración de intercambio.

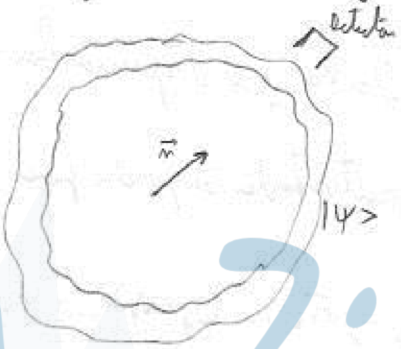
La función de onda varía

· Experimento: dos partículas se dicen idénticas cuando tienen las mismas propiedades intrínsecas.

Esto NO depende de las condiciones experimentales. (Aunque en un experimento no detecte la carga, electrón y positrón son diferentes)

· Clásicamente esto no existe: se puede, siguiendo la trayectoria, conocer toda la historia de cada partícula y distinguirlas.

En cuántica NO podemos seguir trayectorias: si considero dos partículas que chocan, al principio veo dos paquetes de ondas, que al interactuar se mezclan. Después de la interacción el estado será una especie de cascarón esférico:



La probabilidad de detectar una partícula es

$$P = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$$

Con $|\psi_n\rangle = |1:\vec{n}\,;\, 2:-\vec{n}\rangle \equiv |\psi_1\rangle$ (la partícula 1 la sigo en la dirección $\vec{n}$ y la 2 la $-\vec{n}$)

o bien $|\psi_n\rangle = |2:\vec{n}\,;\, 1:-\vec{n}\rangle \equiv |\psi_2\rangle$

$\Downarrow$

Tengo 2 kets diferentes para representar lo mismo

¿Cómo calculo la probabilidad?

¿$|\langle \psi_1 | \psi \rangle|^2$? ¿$|\langle \psi_2 | \psi \rangle|^2$?

¿$|\langle \psi_1 | \psi \rangle \pm \langle \psi_2 | \psi \rangle|^2$?

· Es decir, NO SÉ ESCRIBIR EL ESTADO $|\psi_n\rangle$ DE LAS DOS PARTÍCULAS.

· Otro ejemplo: me fijo en $\mathcal{E}_s$, con dos partículas de spin 1/2. Una está en $|+\rangle$; la otra en $|-\rangle$.

El ket de ambas partículas se escribe: (dos partículas diferenciadas, pero con estados de spin diferentes)

$$|+-\rangle = |1:+;2:-\rangle$$

¿Y por qué no $|-+\rangle$? A mí me dijeron que una partícula está en $|+\rangle$ y otra en $|-\rangle$

De hecho, $\alpha|+-\rangle+\beta|-+\rangle$ es también admisible ($|\alpha|^2>|\beta|^2$ implicaría que es más probable que la 1 esté en $|+\rangle$)

· Vamos a calcular la probabilidad de que al medir S_x se obtenga $\hbar/2$ (en ambas):

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

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

$$P=\frac{1}{4}\left|\left(\langle++|+\langle+-|+\langle-+|+\langle--|\right)\left(\alpha|+-\rangle+\beta|-+\rangle\right)\right|^2=\frac{1}{4}|\alpha+\beta|^2$$

pero α y β son arbitrarios!!!!

· Es decir, no sé escribir el estado cuántico de las dos partículas y, por tanto, no sé hacer cuentas.

· Vamos a arreglar esto: Sean N partículas

$$|\psi\rangle=|\underbrace{1:\varphi_1}_{\text{Estado cuántico de la partícula 1}};2:\varphi_2;\dots;i:\varphi_i;j:\varphi_j;\dots;N:\varphi_N\rangle\equiv|i:\varphi_i;j:\varphi_j\rangle$$

defino el <u>operador permutación</u> P_{ij} como aquel que <u>permuta las partículas i y j</u>. (permuta sus estados cuánticos)

$$P_{ij} | i:\varphi_i ; j:\varphi_j \rangle = | i:\varphi_j ; j:\varphi_i \rangle$$

· Veamos si es hermítico: (comprobando que los elementos de matriz son hermíticos)

$$\langle 1:\varphi_i ; 2:\varphi_j | P_{ij} | 1:\varphi_i' ; 2:\varphi_j' \rangle =$$

$$= \langle 1:\varphi_i ; 2:\varphi_j | 1:\varphi_j' ; 2:\varphi_i' \rangle = \delta_{\varphi_i \varphi_j'} \delta_{\varphi_j \varphi_i'}$$

$$\langle 1:\varphi_i ; 2:\varphi_j | P_{ij}^\dagger | 1:\varphi_i' ; 2:\varphi_j' \rangle =$$

$$= \langle 1:\varphi_i' ; 2:\varphi_j' | P_{ij} | 1:\varphi_i ; 2:\varphi_j \rangle^* =$$

$$= \langle 1:\varphi_i' ; 2:\varphi_j' | 1:\varphi_j ; 2:\varphi_i \rangle^* = \delta_{\varphi_i' \varphi_j} \delta_{\varphi_j' \varphi_i}$$

que es lo mismo $\Rightarrow P_{ij} = P_{ij}^\dagger$

· Consideremos un estado $|\alpha\rangle$ autovector de P_{ij} : $P_{ij} |\alpha\rangle = \underbrace{\lambda}_{\in \mathbb{R}} |\alpha\rangle$

Nótese que $(P_{ij})^2 = \mathbb{1}$ por definición :

$$|\alpha\rangle = \mathbb{1} |\alpha\rangle = P_{ij} P_{ij} |\alpha\rangle = \lambda^2 |\alpha\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda = \pm 1$$

$\underline{\lambda = 1} \Rightarrow |\alpha\rangle$ se dice <u>simétrico</u>

$\underline{\lambda = -1} \Rightarrow |\alpha\rangle$ se dice <u>antisimétrico</u>

· Sea H el Hamiltoniano del sistema (CUALQUIERA). Supongamos que $|i:\varphi_i; j:\varphi_j\rangle$ es autoestado de H.

Si las partículas i y j son idénticas, aplicar P_{ij} al sistema no afecta:

$$H|i:\varphi_i; j:\varphi_j\rangle = E|i:\varphi_i; j:\varphi_j\rangle$$

$$H|i:\varphi_j; j:\varphi_i\rangle = E|i:\varphi_j; j:\varphi_i\rangle$$

es decir: $$H P_{ij}|i:\varphi_i; j:\varphi_j\rangle = E|i:\varphi_j; j:\varphi_i\rangle$$ (si el estado no fuese autoestado, sería C.L. y da lo mismo)

y si aplico P a la 1ª ecuación: $$P_{ij} H|i:\varphi_i; j:\varphi_j\rangle = E|i:\varphi_j; j:\varphi_i\rangle$$

· Es decir, <u>H conmuta con P_{ij} si P_{ij} permuta partículas idénticas</u>: tendrán base propia común.

· Estamos en condiciones de:

<u>Postulado de simetrización</u>: cuando un sistema contiene partículas idénticas sólo algunos kets del espacio de estados pueden describir estados físicos. Estos kets deben ser autoestados del operador permutación:

Simétricos: bosones (spin entero)

Antisimétricos: fermiones (spin semientero)

$\Downarrow$

Teorema spin-estadística

· Supongamos que tenemos dos partículas idénticas. Sea $S = \frac{1}{2}[1 + P_{21}]$

$$P_{21}(S|\psi\rangle) = P_{21}\,\frac{1}{2}[1+P_{21}]|\psi\rangle = \frac{1}{2}[P_{21}+1]|\psi\rangle =$$

$$= \frac{1}{2}[1+P_{21}]|\psi\rangle = S|\psi\rangle$$

$$\Downarrow$$

$S|\psi\rangle$ es autovector de P_{21} con autovalor 1

S simetriza cualquier ket. (simetrizador)

· Análogamente, $A = [1-P_{21}]$ antisimetriza cualquier ket. (antisimetrizador)

· Vamos a comprobar que tanto S como A son proyectores:

$$S^2 = \frac{1}{2}[1+P_{21}]\frac{1}{2}[1+P_{21}] = \frac{1}{4}[1+P_{21}+P_{21}+1] = \frac{1}{2}[1+P_{21}] = S$$

$$A^2 = \frac{1}{2}[1-P_{21}]\frac{1}{2}[1-P_{21}] = \frac{1}{4}[1-P_{21}-P_{21}+1] = \frac{1}{2}[1-P_{21}] = A$$

· Así, nos sirven para escribir estados cuánticos. Sean, por ejemplo, dos partículas idénticas; de estados $|\varphi_1\rangle$ y $|\varphi_2\rangle$:

$$|1:\varphi_1;\,2:\varphi_2\rangle$$

$$S|1:\varphi_1;2:\varphi_2\rangle = \frac{1}{2}[1+P_{12}]|1:\varphi_1;\,2:\varphi_2\rangle = \frac{1}{2}\left[|1:\varphi_1;\,2:\varphi_2\rangle + |1:\varphi_2;\,2:\varphi_1\rangle\right]$$

y normalizando, queda:

$$\overset{\text{simétrico}}{|^{S}\psi\rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1:\varphi_1;\,2:\varphi_2\rangle + |1:\varphi_2;\,2:\varphi_1\rangle\right]$$ → Hay una partícula en φ_1 y otra en φ_2

si fueran fermiones, habría que aplicar A:

$$\overset{\text{antisimétrico}}{|^{A}\psi\rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1:\varphi_1;\,2:\varphi_2\rangle - |1:\varphi_2;\,2:\varphi_1\rangle\right]$$

· Nótese que si $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi \Rightarrow |^A\psi\rangle = 0 \Rightarrow$ **Principio de exclusión de Pauli**: no puede haber dos fermiones en el mismo estado cuántico.

Ejemplo: dos partículas de spin 1/2:

Aplicándolo a cualquiera de los estados da lo mismo

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

· Si hay más de dos partículas, se emplea lo que se llama determinante de Slater:

(válido si los $|\varphi_i\rangle$ son ortonormales)

$$\boxed{|^A\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |1:\varphi_2\rangle & \dots & |1:\varphi_N\rangle \\ |2:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \dots & |2:\varphi_N\rangle \\ & \vdots & & \\ |N:\varphi_1\rangle & |N:\varphi_2\rangle & \dots & |N:\varphi_N\rangle \end{vmatrix}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left\| |1:\varphi_1\rangle\ |2:\varphi_2\rangle \dots |N:\varphi_N\rangle \right\|$$

sólo pongo la diagonal principal

Si son bosones, se hace el determinante pero siempre sumando.

· Si tenemos un conjunto de átomos: ¿qué son, bosones o fermiones? Vamos intercambiando partículas entre sí, y la función de onda va cambiando de signo $\Rightarrow$

- Nº impar de fermiones $\Rightarrow$ el átomo es un fermión
- Nº par de fermiones $\Rightarrow$ el átomo es un bosón

Ejemplo: pozo infinito con dos partículas no interactuantes de spin 1/2. ¿Energía del nivel fundamental? ¿Grado de degeneración?

$E_n = n^2 E_0$. Si las partículas son diferentes, la energía es $2\cdot E_0$; de degeneración 4:

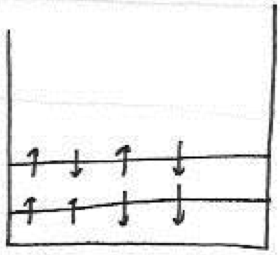
$\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ (el estado orbital es el mismo para ambas)

$\{|1:\varphi_0 +; 2:\varphi_0 +\rangle, |1:\varphi_0 +; 2:\varphi_0 -\rangle, \dots\}$

Si son idénticas: por Pauli, la energía del fundamental va a ser $2\cdot E_0$ (el spin no altera la degeneración); pero la degeneración es ahora 1: (pues el estado debe ser antisimétrico)

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1:\varphi_0 +; 2:\varphi_0 -\rangle - |1:\varphi_0 -; 2:\varphi_0 +\rangle\right]\right\}$$

Vamos al 1er excitado:



$$E = 5E_0 \; (E_0 + 4E_0)$$

$\Rightarrow g = 4$

Los estados son:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1:\varphi_0+;\,2\varphi_1+\rangle - |1:\varphi_1+;\,2:\varphi_0+\rangle\right] \quad \text{(antisimétricos)}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1:\varphi_0+\rangle;\,2\varphi_1-\rangle - |1:\varphi_1-;\,2:\varphi_0+\rangle\right]$$

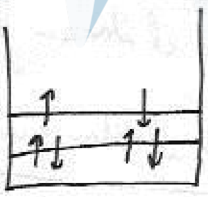
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1:\varphi_0-;\,2:\varphi_1+\rangle - |1:\varphi_1+;\,2:\varphi_0-\rangle\right]$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,|1:\varphi_0-;\,2:\varphi_1-\rangle - |1:\varphi_1-;\,2:\varphi_0-\rangle\right]$$

Si tengo 3 fermiones idénticos, la cosa es aún más divertida:

· Por Pauli, uno de los fermiones debe estar en el 1er excitado $\Rightarrow E = 4E_0 + 2E_0 = 6E_0$

· Cuidado con Pauli puede calcular la energía al tope el estado mitad



→ Nótese que algo no puede ponerse

$g = 2 \Longrightarrow$ Tengo dos posibles dets de Slater

"Truqui": puede ser interesante desarrollarlo por filas para no perderse

$$\cdot\ \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix} 1:\varphi_0+ & 1:\varphi_0- & 1:\varphi_1+ \\ 2:\varphi_0+ & 2:\varphi_0- & 2:\varphi_1+ \\ 3:\varphi_0+ & 3:\varphi_0- & 3:\varphi_1+ \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big[\,|1:\varphi_0+;\,2:\varphi_0+;\,3:\varphi_1+\rangle + |1:\varphi_0-;\,2:\varphi_1+;\,3:\varphi_0+\rangle + |1:\varphi_1+;\,2:\varphi_0+;\,3:\varphi_0-\rangle - |1:\varphi_1+;\,2:\varphi_0-;\,3:\varphi_0+\rangle - |1:\varphi_0+;\,2:\varphi_1+;\,3:\varphi_0-\rangle - |1:\varphi_0-;\,2:\varphi_0+;\,3:\varphi_1+\rangle\Big]$$

$$\cdot\ \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix} 1:\varphi_0+ & 1:\varphi_0- & 1:\varphi_1- \\ 2:\varphi_0+ & 2:\varphi_0- & 2:\varphi_1- \\ 3:\varphi_0+ & 3:\varphi_0- & 3:\varphi_1- \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big[\,|1:\varphi_0+;\,2:\varphi_0-;\,3:\varphi_1-\rangle + |1:\varphi_0-;\,2:\varphi_1-;\,3:\varphi_0+\rangle +$$

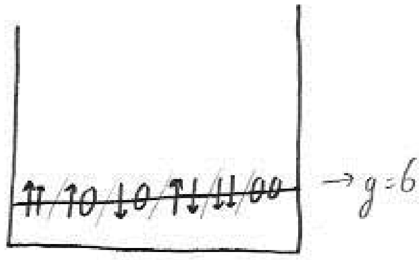
$+\,|1{:}\varphi_1-;\,2{:}\varphi_0+;\,3{:}\varphi_0-\rangle - |1{:}\varphi_1-;\,2{:}\varphi_0-;\,3{:}\varphi_0+\rangle - |1{:}\varphi_0+;\,2{:}\varphi_1-;\,3{:}\varphi_0-\rangle -$

$- |1{:}\varphi_0-;\,2{:}\varphi_0+;\,3{:}\varphi_1-\rangle\,]$

<u>Ejemplo</u>: 2 partículas idénticas de spin 1

$E = 2E_0$

Como no hay Pauli:



Los estados son:

$|1{:}\varphi_0\uparrow;\,2{:}\varphi_0\uparrow\rangle$ → Ya es simétrico!!!

$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1{:}\varphi_0\uparrow;\,2{:}\varphi_0 0\rangle + |1{:}\varphi_0 0;\,2{:}\varphi_0\uparrow\rangle\right)$

$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1{:}\varphi_0\downarrow;\,2{:}\varphi_0 0\rangle + |1{:}\varphi_0 0;\,2{:}\varphi_0\downarrow\rangle\right)$

$|1{:}\varphi_0\downarrow;\,2{:}\varphi_0\downarrow\rangle$

$|1{:}\varphi_0 0;\,2{:}\varphi_0 0\rangle$

CÁLCULO DE PROBABILIDADES

· Calculamos probabilidades. Empezamos con dos partículas, en estados $|\psi\rangle$ y $|\chi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1:\psi\,;2:\chi\rangle \pm |1:\chi\,;2:\psi\rangle\right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\psi,\chi\rangle + \overset{1\text{ bosón},\ -1\text{ fermión}}{\varepsilon}|\chi,\psi\rangle\right]$$

Si mido B en ambas partículas ($B_i|u_i\rangle = b_i|u_i\rangle$); me pregunto por la probabilidad de medir en una partícula b_n y en la otra b_p.

· El ket de ese resultado es $|\psi_{np}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|u_n,u_p\rangle + \varepsilon|u_p,u_n\rangle\right]$

así la probabilidad vale $P_{n,p} = |\langle\psi_{np}|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\left(\langle u_n,u_p| + \varepsilon\langle u_p,u_n|\right)\left(|\psi,\chi\rangle + \varepsilon|\chi,\psi\rangle\right)\right|^2$

$$= \frac{1}{4}\left|\langle u_n,u_p|\psi,\chi\rangle + \langle u_p,u_n|\psi,\chi\rangle + \varepsilon\langle u_n,u_p|\chi,\psi\rangle + \varepsilon\langle u_p,u_n|\psi,\chi\rangle\right|^2 =$$

$$= \frac{1}{4}\left|\langle u_n|\psi\rangle\langle u_p|\chi\rangle + \langle u_p|\psi\rangle\langle u_n|\chi\rangle + \varepsilon\langle u_n|\chi\rangle\langle u_p|\psi\rangle + \varepsilon\langle u_p|\psi\rangle\langle u_n|\chi\rangle\right|^2 =$$

$$= \boxed{\Big|\underbrace{\langle u_n|\psi\rangle\langle u_p|\chi\rangle}_{\text{Término directo}} + \underbrace{\varepsilon\langle u_n|\chi\rangle\langle u_p|\psi\rangle}_{\text{Término de intercambio}}\Big|^2 = P_{n,p}}$$

Término directo:

$|u_n\rangle \longleftrightarrow |\psi\rangle$

$|u_p\rangle \longleftrightarrow |\chi\rangle$

Término de intercambio:

$|u_n\rangle \longleftrightarrow |\chi\rangle$

$|u_p\rangle \longleftrightarrow |\psi\rangle$

· Si las partículas fueran distinguibles,

$$P_{n,p} = |\langle u_n,u_p|\psi,\chi\rangle|^2 + |\langle u_p,u_n|\chi,\psi\rangle|^2 =$$ (mido n y p, sin distinguir en qué partícula)

$$= |\langle u_n|\psi\rangle|^2|\langle u_p|\chi\rangle|^2 + |\langle u_p|\chi\rangle|^2|\langle u_n|\psi\rangle|^2$$

Si quiero la probabilidad de medir b_n en ambas:

$$P_n = |\langle u_n, u_n | \varphi, \chi \rangle|^2 = |\langle u_n|\varphi\rangle|^2 |\langle u_n|\chi\rangle|^2$$

pero si son idénticas (deben ser bosones, si no vale 0)

$$P_n = \left| \langle u_n, u_n| \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi, \chi\rangle + |\chi, \varphi\rangle) \right) \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{2} \left| \langle u_n, u_n|\varphi, \chi\rangle + \langle u_n, u_n|\chi, \varphi\rangle \right|^2 =$$

$$= \frac{1}{2} \left| \langle u_n|\varphi\rangle \langle u_n|\chi\rangle + \langle u_n|\chi\rangle\langle u_n|\varphi\rangle \right|^2 =$$

$$= 2 \left(|\langle u_n|\varphi\rangle| \, |\langle u_n|\chi\rangle| \right)^2$$, el doble que si son distinguibles

(hay más maneras de tener ese partículas)

$\Downarrow$

cualquiera de las dos puede estar en $|\varphi\rangle$ o en $|\chi\rangle$, no una en $|\varphi\rangle$ y otra en $|\chi\rangle$

¿Cuándo hace falta (anti)simetrizar?

$$P^{dist} = |\langle u_n|\varphi\rangle|^2 |\langle u_p|\chi\rangle|^2 + |\langle u_p|\chi\rangle|^2 |\langle u_n|\varphi\rangle|^2$$

$$P^{id} = |\langle u_n|\varphi\rangle|^2 |\langle u_p|\chi\rangle|^2 + |\langle u_p|\chi\rangle|^2 |\langle u_n|\varphi\rangle|^2 + \langle\varphi|u_n\rangle\langle\chi|u_p\rangle\langle u_n|\chi\rangle\langle u_p|\varphi\rangle + \langle u_n|\varphi\rangle\langle u_p|\chi\rangle\langle\chi|u_n\rangle\langle\varphi|u_p\rangle$$

$|z_1+z_2|^2 = |z_1|^2+|z_2|^2+z_1^*z_2+z_2^*z_1$

hace que sea lo mismo

$$\langle\varphi|u_n\rangle\langle u_n|\chi\rangle$$

y

$$\langle\chi|u_p\rangle\langle u_p|\varphi\rangle$$

deben ser despreciables. Si, por ejemplo, no son estados de posición las funciones de onda no deben solaparse. Si no, que si son estados de posición y la parte de spin es ortogonal (o viceversa), no hace falta (anti)simetrizar

OPERACIÓN EVOLUCIÓN

· Ecuación de Schrödinger: $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$

· Defino el operador evolución $U(t)$:

$$|\psi(t)\rangle = U(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

U es $\underline{\underline{\text{lineal}}}$ por la de la ecuación de Schrödinger (si $|\psi(0)\rangle = \sum \lambda_i |\psi_i(0)\rangle$, $|\psi(t)\rangle = \sum \lambda_i |\psi_i(t)\rangle$)

· Ahora:

$$\underline{U(0) = \mathbb{1}}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\left(U(t)|\psi(0)\rangle\right) = H(t)U(t)|\psi(0)\rangle \Rightarrow \underline{i\hbar \frac{d}{dt}U(t) = H(t)\,U(t)}$$

EDO + C.I. $\Rightarrow U(t)$ está unívocamente definido

· Evidentemente, $U(t) = F(H(t))$. Como $[H(t), P_{ij}] = 0 \Rightarrow \boxed{[U, P_{ij}] = 0}$

SCATTERING

· Sean dos partículas que, en su C.M., inicialmente se mueven según $\hat{u}_x$ y $-\hat{u}_x$. Interaccionan, y después se mueven según $\hat{n}$ y $-\hat{n}$:

son indistinguibles

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1:\hat{n};2:-\hat{n}\rangle + \varepsilon|1:-\hat{n};2:\hat{n}\rangle\right] \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\hat{n};-\hat{n}\rangle + \varepsilon|-\hat{n};\hat{n}\rangle\right]$$

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\hat{u}_x;-\hat{u}_x\rangle + \varepsilon|-\hat{u}_x;\hat{u}_x\rangle\right]$$

· La probabilidad de que al final salgan en dirección $\hat{n}$ vale:

$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0\rangle$

$$P = |\langle\psi_f|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\left[\langle\hat{n};-\hat{n}| + \varepsilon\langle-\hat{n};\hat{n}|\right]U\left[|\hat{u}_x;-\hat{u}_x\rangle + \varepsilon|-\hat{u}_x;\hat{u}_x\rangle\right]\right|^2 =$$

Lo conocemos

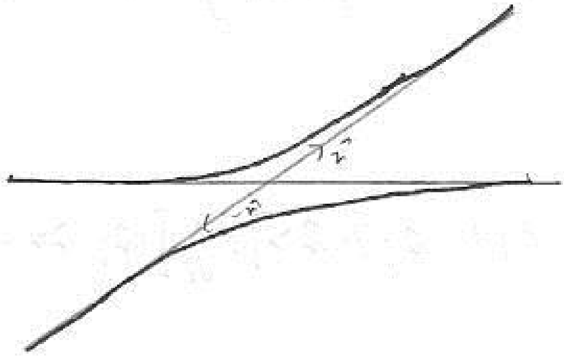
$$= \frac{1}{4}\left|\langle\hat{n};-\hat{n}|U|\hat{u}_x;-\hat{u}_x\rangle + \varepsilon\langle\hat{n};-\hat{n}|U|-\hat{u}_x;\hat{u}_x\rangle + \varepsilon\langle-\hat{n};\hat{n}|U|\hat{u}_x;-\hat{u}_x\rangle + \langle-\hat{n};\hat{n}|U|-\hat{u}_x;\hat{u}_x\rangle\right|^2$$

Ahora, $|-\hat{u}_x;\hat{u}_x\rangle = P_{21}|\hat{u}_x;-\hat{u}_x\rangle$. Conmutándolo con U y aplicándolo al bra (se puede porque es hermítico):

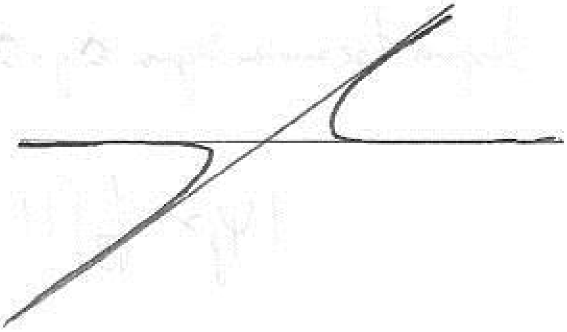
$$P = \left|\underbrace{\langle\hat{n};-\hat{n}|U|\hat{u}_x;-\hat{u}_x\rangle}_{\text{Término directo}} + \varepsilon\underbrace{\langle-\hat{n};\hat{n}|U|\hat{u}_x;-\hat{u}_x\rangle}_{\text{Término de intercambio}}\right|^2$$

Graficando:

Térm. directo



Térm. inverso



Se suman amplitudes complejas, no probabilidades (hay interferencia)

. Supongamos que inicialmente las partículas se encuentran en estados ortogonales de spin; con un hamiltoniano H totalmente orbital.

$$|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\hat{n}_x \oplus ; -\hat{n}_x \ominus\rangle + \varepsilon\, |-\hat{n}_x \ominus ; \hat{n}_x \oplus\rangle \right]$$

tras la colisión: $|\psi\rangle = U|\psi_a\rangle$

hay dos posibles estados finales para cada dirección:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\hat{n} \oplus ; -\hat{n} \ominus\rangle + \varepsilon\, |-\hat{n} \ominus ; \hat{n} \oplus\rangle \right]$$ (en dirección inicial $d\Theta$ y a $-\hat{n}\, d\Theta$)

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\hat{n} \ominus ; -\hat{n} \oplus\rangle + \varepsilon\, |-\hat{n} \oplus ; \hat{n} \ominus\rangle \right]$$

La probabilidad vale, por tanto:

$$P = |\langle \psi_1 | \psi \rangle|^2 + |\langle \psi_2 | \psi \rangle|^2$$

haciendo las cuentas (son totalmente análogas a las anteriores, pues V no afecta ni a ⊕ ni a ⊖)

$$\langle \psi_1 | \psi \rangle = \langle \hat{n} \oplus ; -\hat{n} \ominus | V | \hat{n}_x \oplus ; -\hat{n}_x \ominus \rangle + \varepsilon \underbrace{\langle -\hat{n} \ominus ; \hat{n} \oplus | V | \hat{n}_x \oplus ; -\hat{n}_x \ominus \rangle}_{=0}$$

0 por ortogonalidad de los estados de spin (V no afecta)

$$\langle \psi_2 | \psi \rangle = \underbrace{\langle \hat{n} \ominus ; -\hat{n} \oplus | V | \hat{n}_x \oplus ; -\hat{n}_x \ominus \rangle}_{=0} + \varepsilon \langle -\hat{n} \oplus ; \hat{n} \ominus | V | \hat{n}_x \oplus ; -\hat{n}_x \ominus \rangle$$

Así, $P = |\langle \hat{n} \oplus ; -\hat{n} \ominus | V | \hat{n}_x \oplus ; -\hat{n}_x \ominus \rangle|^2 + |\langle \hat{n} \ominus ; -\hat{n} \oplus | V | \hat{n}_x \oplus ; -\hat{n}_x \ominus \rangle|^2$

- Si las partículas fueran distinguibles:

$$|\psi_0\rangle = |\hat{n}_x ; -\hat{n}_x\rangle$$

$$P = |\langle \hat{n} ; -\hat{n} | V | \hat{n}_x ; -\hat{n}_x \rangle|^2 + |\langle -\hat{n} ; \hat{n} | V | \hat{n}_x ; -\hat{n}_x \rangle|^2$$

así, <u>la probabilidad es la misma</u>!! (al introducir un spin diferente, he introducido distinguibilidad)

¿CUÁNDO ES NECESARIO (ANTI)SIMETRIZAR?

· Analicemos más en detalle lo último que hemos visto. → ¿Entonces, al estudiar 2 átomos de Hidrógeno, tener en cuenta la función de onda de TODOS los e^- del universo y antisimetrizar? por lo que sigue

Sean dos átomos de Hidrógeno:

$\psi_a(x_1)$ $\qquad$ $\psi_b(x_2)$

$$\int dx_1 |\psi_a(x_1)|^2 = 1$$

$$\int dx_2 |\psi_b(x_2)|^2 = 1$$

a priori, el estado cuántico de ambos e^- sería, ingenuamente:

$$\psi_{ab}(x_1,x_2) = \psi_a(x_1)\,\psi_b(x_2) \qquad \left(\int dx_1 dx_2 |\psi_{ab}|^2 = 1\right)$$

ahora bien, habría que considerar $\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)$ y antisimetrizar

$$\psi(x_1,x_2) = \frac{1}{N}\left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)\right]$$

con N t.q.: $$\frac{1}{N^2}\int |\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)|^2 dx_1 dx_2 = 1 =$$

$$= \frac{1}{N^2}\int \left(\psi_a^*(x_1)\psi_b^*(x_2) - \psi_a^*(x_2)\psi_b^*(x_1)\right)\left(\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)\right)dx_1dx_2 =$$

$$= \frac{1}{N^2}\int\Big[\underbrace{|\psi_a(x_1)|^2|\psi_b(x_2)|^2}_{1} + \underbrace{|\psi_a(x_2)|^2|\psi_b(x_1)|^2}_{1} - \psi_a^*(x_1)\psi_b(x_1)\psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2) -$$

$$- \psi_a^*(x_2)\psi_b(x_2)\psi_b^*(x_1)\psi_a(x_1)\Big]dx_1dx_2 = \frac{1}{N^2}\Big[2 - \underbrace{\underbrace{\int \psi_a^*(x_1)\psi_b(x_1)dx_1}_{=Z}\underbrace{\int\psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2)dx_2}_{Z^*}}_{|Z|^2} -$$

$$- \underbrace{\int \psi_a^*(x_2)\psi_b(x_2)dx_2 \int \psi_b^*(x_1)\psi_a(x_1)dx_1}_{|S_{ab}|^2}\Big]$$

con $Z = \int \psi_a^*(x)\psi_b(x)\,dx \equiv S_{ab}$ (integral de solapamiento)

Así, $1 = \dfrac{2 - 2|S_{ab}|^2}{N^2}$

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1-|S_{ab}|^2)}}\left[\psi_a(x_1)\,\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\,\psi_b(x_1)\right]$$

Vamos a calcular la probabilidad de encontrar al e⁻ del átomo a en una región cualquiera $\mathcal{R}$ del espacio. (y la cualquier otro sitio)

· Sin antisimetrizar:
$$P_{a\mathcal{R}} = \int_{\mathcal{R}} dx_1\,|\psi_a(x_1)|^2 \underbrace{\int_{\mathbb{R}^n} dx_2\,|\psi_b(x_2)|^2}_{1} = \int_{\mathcal{R}} dx_1\,|\psi_a(x_1)|^2$$

· Antisimetrizando:
$$P_{a\mathcal{R}} = \frac{1}{N^2}\Big[\int_{\mathcal{R}} dx_1\,|\psi_a(x_1)|^2 \underbrace{\int_{\mathbb{R}^n} dx_2\,|\psi_b(x_2)|^2}_{1} + \underbrace{\int_{\mathbb{R}^n} dx_1\,|\psi_b(x_1)|^2}_{1} \int_{\mathcal{R}} dx_2\,|\psi_a(x_2)|^2 -$$

la la región de $\mathcal{R}$ en x_2 es ... , puede ... región ...

$$- \int_{\mathcal{R}} dx_1\,\psi_a^*(x_1)\,\psi_b(x_1) \int_{\mathcal{R}} dx_2\,\psi_b^*(x_2)\,\psi_a(x_2) - \int_{\mathcal{R}} dx_2\,\psi_a^*(x_2)\psi_b(x_2) \int_{\mathcal{R}} dx_1\,\psi_b^*(x_1)\psi_a(x_1)\Big]$$

Como es la a, debo integrar sólo sobre $\mathcal{R}$ (el operador correspondiente $\theta(\mathcal{R})$) $\quad \int_{\mathcal{R}} |\langle x|\psi_a\rangle|^2 dx$

$$P_{a\mathcal{R}} = \frac{1}{N^2}\left[2\int_{\mathcal{R}} |\psi_a(x)|^2 dx - 2\int_{\mathcal{R}} dx\,\psi_a^*(x)\,\psi_b(x) \int_{\mathcal{R}} dy\,\psi_b^*(y)\,\psi_a(y)\right]$$

$$P_{a\mathcal{R}} = \frac{2}{N^2}\left[\int_{\mathcal{R}} |\psi_a(x)|^2 dx - \left|\int_{\mathcal{R}} dx\,\psi_a^*(x)\,\psi_b(x)\right|^2\right]$$

Ahora bien, si ψ_a y ψ_b ambas probabilidades coinciden.

Moraleja: sólo hay que simetrizar/antisimetrizar cuando en todo instante de tiempo a estudiar las funciones de onda ~~...~~ se solapan

OBSERVABLE FÍSICO

· Es aquel que es invariante ante la permutación de partículas idénticas. Son los únicos que tienen sentido real.

$\vec{P}_1 + \vec{P}_2 + \vec{P}_3 + \dots$
$\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \dots$
$\vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$
$|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$
} SÍ

$\vec{R}_1 - \vec{R}_2 \Rightarrow$ NO (pues exige discernir entre las partículas)

· Por tanto, el subespacio de vectores simétricos/antisimétricos es G-invariante, siendo G un observable físico. Esto es consecuencia de que $[G, P_{ij}] = 0$

Sea $|\psi_n\rangle$ autoestado de G (ya (anti)simetrizado)

$P_{ij} G P_{ij} |\psi_n\rangle = \sum P_{ij} G |\psi_n\rangle = \sum g_n P_{ij} |\psi_n\rangle = g_n |\psi_n\rangle = G|\psi_n\rangle \Rightarrow P_{ij} G P_{ij} |\psi_n\rangle = G|\psi_n\rangle \underset{\text{Expando } |\psi\rangle \text{ en la base } |\psi_n\rangle}{\Longrightarrow} P_{ij} G P_{ij} |\psi\rangle = G|\psi\rangle \; \forall |\psi\rangle$

es decir, $P_{ij} G P_{ij} = G \underset{\text{multiplico por la derecha por } P_{ij}}{\Longleftrightarrow} P_{ij} G = G P_{ij}$ C.Q.D.

Demostración:

$$P_{ij} |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle$$

$$G|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$

$$P_{ij} |\psi'\rangle = P_{ij} G |\psi\rangle = G P_{ij} |\psi\rangle = \varepsilon G |\psi\rangle = \varepsilon |\psi'\rangle \text{ C.Q.D.}$$

DOS PARTÍCULAS IDÉNTICAS EN 1D

hermítico

$$H = \underbrace{\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2} + V(x_1)}_{H_A} \underbrace{- \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2} + V(x_2)}_{H_B}}_{H_0 \text{ (no depende del spin)}} + \underbrace{\underbrace{V'(|x_1 - x_2|)}_{H_{AB}}}_{H_1}$$

· Suponemos:
- $V' > 0$ (repulsivo)
- H_1 una perturbación de H_0

· El estado cuántico lo denotamos por $\Psi^{(0)}_{n\varepsilon}(x)$

orbital ↳ spin

$$\Psi^{(0)}_{n_1 n_2 \varepsilon_1 \varepsilon_2}(x_1, x_2) = \Psi^{(0)}_{n_1 \varepsilon_1}(x_1)\, \Psi^{(0)}_{n_2 \varepsilon_2}(x_2)$$

$$E^{(0)}_{n_1 n_2} = E^{(0)}_{n_1} + E^{(0)}_{n_2}$$

pero hay que simetrizar.

BOSONES DE SPIN NULO

· $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0 \Rightarrow$ No ahorramos esa parte

$${}^S\Psi^{(0)}_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi^{(0)}_{n_1}(x_1)\,\Psi^{(0)}_{n_2}(x_2) + \Psi^{(0)}_{n_2}(x_1)\,\Psi^{(0)}_{n_1}(x_2)\right]$$

→ fórmula válida para $n_1 \neq n_2$, pues en caso de estados ser ortogonales entre sí

el estado fundamental será con $n_1 = n_2 = 1$:

$${}^S\Psi^{(0)}_{11}(x_1, x_2) = \Psi^{(0)}_1(x_1)\,\Psi^{(0)}_1(x_2) \quad ; \quad E^{(0)}_{11} = 2E^{(0)}_1$$

nos degenerado (en potenciales unidimensionales los estados ligados no son degenerados):

$$< \psi_{11}^{(0)} | V'(|x_1-x_2|) | \psi_{11}^{(0)} > :$$

$$= \int dx_1 dx_2 |\psi_1^{(0)}(x_1)|^2 |\psi_1^{(0)}(x_2)|^2 V'(|x_1-x_2|) \equiv J_{11} \quad \text{(integral directa)}$$

$$E_{11} = 2E_1^{(0)} + J_{11}$$

en general,

$$\boxed{\begin{array}{l} J_{nn'} \equiv \int dx_1 dx_2 |\psi_n^{(0)}(x_1)|^2 V'(|x_1-x_2|) |\psi_{n'}^{0}(x_2)|^2 \rightarrow \underline{\text{integral directa}} \\ J_{nn'} = J_{n'n} \quad \text{(tiene análogo clásico: interacción entre densidades de carga)} \end{array}}$$

· En el segundo nivel la cosa es más divertida:

$$< \psi_{12}^{(0)} | V' | \psi_{21}^{(0)} > = \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \left[\psi_1^{(0)*}(x_1) \psi_2^{(0)*}(x_2) + \psi_2^{(0)*}(x_1) \psi_1^{(0)*}(x_2) \right] V'(|x_1-x_2|) \cdot$$

$$\cdot \left[\psi_1^{(0)}(x_1) \psi_2^{(0)}(x_2) + \psi_2^{(0)}(x_1) \psi_1^{(0)}(x_2) \right] :$$

$$= \frac{1}{2} \Bigg[\overbrace{\int dx_1 dx_2 |\psi_1^{(0)}(x_1)|^2 V' |\psi_2^{(0)}(x_2)|^2}^{J_{12}} + \overbrace{\int dx_1 dx_2 |\psi_2^{(0)}(x_1)|^2 V' |\psi_1^{(0)}(x_2)|^2}^{J_{21}} + \overbrace{\int dx_1 dx_2 \psi_1^{(0)*}(x_1) \psi_2^{(0)}(x_1) V' \psi_2^{(0)*}(x_2) \psi_1^{(0)}(x_2)}^{K_{12}} +$$

$$+ \underbrace{\int dx_1 dx_2 \psi_2^{(0)*}(x_1) \psi_1^{(0)}(x_1) V' \psi_1^{(0)*}(x_2) \psi_2^{(0)}(x_2)}_{K_{12}} \Bigg]$$

en general,

$$\boxed{\begin{array}{l} K_{nn'} = \int dx_1 dx_2 \psi_n^{(0)*}(x_1) \psi_{n'}^{(0)}(x_1) V'(|x_1-x_2|) \psi_{n'}^{(0)*}(x_2) \psi_n^{(0)}(x_2) \rightarrow \underline{\text{integral de intercambio}} \\ K_{nn'} = K_{n'n} \end{array}}$$

$$E_{12} = E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + \frac{1}{2}\left[J_{12} + K_{12}\right]$$

en general:

$$\boxed{E_{nn'} = E_n^{(0)} + E_{n'}^{(0)} + \frac{1}{2}\left[J_{nn'} + K_{nn'}\right]}$$

FERMIONES DE SPIN 1/2

· ~~Considerar que el spin sólo puede estar en los estados~~ α ó β. Los posibles estados son:

En realidad estoy hallando un estado cualquiera, que en la base $|n\, n_2\rangle$ es degenerado

$${}^{A}\Psi^{(0)}_{n_1 n_2 ++} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi^{(0)}_{n_1}(x_1)\alpha(1)\,\Psi^{(0)}_{n_2}(x_2)\alpha(2) - \Psi^{(0)}_{n_2}(x_1)\alpha(1)\,\Psi^{(0)}_{n_1}(x_2)\alpha(2)\right]$$

$${}^{A}\Psi^{(0)}_{n_1 n_2 +-} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi^{(0)}_{n_1}(x_1)\alpha(1)\,\Psi^{(0)}_{n_2}(x_2)\beta(2) - \Psi^{(0)}_{n_2}(x_1)\beta(1)\,\Psi^{(0)}_{n_1}(x_2)\alpha(2)\right]$$

la partícula en n_2 tiene spin β

$${}^{A}\Psi^{(0)}_{n_1 n_2 -+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi^{(0)}_{n_1}(x_1)\beta(1)\,\Psi^{(0)}_{n_2}(x_2)\alpha(2) - \Psi^{(0)}_{n_2}(x_1)\alpha(1)\,\Psi^{(0)}_{n_1}(x_2)\beta(2)\right]$$

$${}^{A}\Psi^{(0)}_{n_1 n_2 --} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi^{(0)}_{n_1}(x_1)\beta(1)\,\Psi^{(0)}_{n_2}(x_2)\beta(2) - \Psi^{(0)}_{n_2}(x_1)\beta(1)\,\Psi^{(0)}_{n_1}(x_2)\beta(2)\right]$$

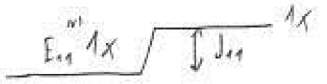
· Si $n_1 = n_2 = n$, el primer y último estado vale 0, y los dos intermedios son iguales pero de signo contrario. Es decir, el estado cuántico es único ⇒ NO HAY DEGENERACIÓN

→ la parte de spin es la antisimétrica

$${}^{A}\Psi^{(0)}_{nn+-} = \Psi^{(0)}_{n}(x_1)\,\Psi^{(0)}_{n}(x_2)\left[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\right]$$

portanto, la corrección vale: (olvidamos la parte de spin, pues V' no le afecta, sólo físico, y vale 1 (normalizado))

$$\langle {}^{A}\Psi^{(0)}_{nn+-} | V' | \Psi^{(0)}_{nn+-} \rangle = J_{nn}$$



$$E_{nn} = 2E_n^{(0)} + J_{nn}$$ → la corrección igual que para bosones

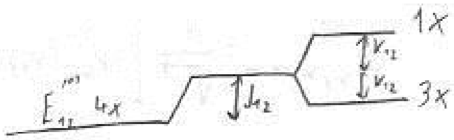
· En estados degenerados, la cosa es a priori bastante puñetera. Pero gracias al spin muchos elementos se van por ortogonalidad. La matriz queda; para $n_1 = 1$, $n_2 = 2$:

$$V' = \begin{pmatrix} J_{12}-K_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_{12} & -K_{12} & 0 \\ 0 & -K_{12} & J_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_{12}-K_{12} \end{pmatrix}$$

queda unas energías:

$J_{12} - K_{12}$ (3 veces degenerado)

$J_{12} + K_{12}$ (1 vez degenerado)



· Resumiendo:

$$\boxed{\begin{aligned} &E_{nn} = 2E_n^{(0)} + J_{nn} \\ &E_{n_1 n_2} = \begin{cases} E^{(0)}_{n_1 n_2} + J_{n_1 n_2} + K_{n_1 n_2} & \rightarrow \text{Singlete } (\times 1) \\ E^{(0)}_{n_1 n_2} + J_{n_1 n_2} - K_{12} & \rightarrow \text{Triplete } (\times 3) \end{cases} \end{aligned}}$$

· Vamos a los autoestados:

$J_{n_1n_2} - K_{n_1n_2} \begin{cases} \vec{V}_1 \\ \vec{V}_2 \\ \vec{V}_3 \end{cases}$

$J_{n_1n_2} + K_{n_1n_2} — \vec{V}_4$

$\vec{V}_1$ y $\vec{V}_3$ los conocemos:

· $\vec{V}_1 = {}^A\psi^{(0)}_{n_1 n_2 ++}$ → la antisimetría está en la parte orbital

· $\vec{V}_3 = {}^A\psi^{(0)}_{n_1 n_2 --}$

y los otros:

· $\vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[{}^A\psi^{(0)}_{n_1 n_2 +-} + {}^A\psi^{(0)}_{n_1 n_2 -+}\right]$

· $\vec{V}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[{}^A\psi^{(0)}_{n_1 n_2 +-} - {}^A\psi^{(0)}_{n_1 n_2 -+}\right]$

Paired ninos:

$$\vec{V}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1}^{(0)}(x_1)\, \psi_{n_2}^{(0)}(x_2) - \psi_{n_2}^{(0)}(x_1)\, \psi_{n_1}^{(0)}(x_2) \right] \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2) \right]$$ → De nuevo, la parte de spin es simétrica y la orbital antisimétrica

$$\vec{V}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{n_1}^{(0)}(x_1)\, \psi_{n_2}^{(0)}(x_2) + \psi_{n_2}^{(0)}(x_1)\, \psi_{n_1}^{(0)}(x_2) \right] \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2) \right]$$ → La parte antisimétrica es ahora la de spin

Si $x_1 = x_2$, $\vec{V}_4$ es el único que no se va ⟹ las partículas pueden acercarse más e interactuar más (el singlete tiene más energía que el triplete)

⇓

Hay una especie de fuerza (fuerza de intercambio)

que se debe a la (anti)simetría de las funciones de onda

Ejercicio: ¿Cómo se plantearía el caso de bosones de spin 1?

El singlete tiene la antisimetría en la parte de spin: $\frac{1}{2}\left[|x_1 x_2\rangle + |x_2 x_1\rangle \right] \otimes \left[|+-\rangle - |-+\rangle \right]$

el triplete no: $\frac{1}{2}\left[|x_1 x_2\rangle - |x_2 x_1\rangle \right] \otimes \left[|+-\rangle + |-+\rangle \right]$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|x_1 x_2\rangle - |x_2 x_1\rangle \right] \otimes |++\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|x_1 x_2\rangle - |x_2 x_1\rangle \right] \otimes |--\rangle$$

SUMA DE MOMENTOS ANGULARES → repaso

· Sean dos momentos angulares $\vec{J}_1$ y $\vec{J}_2$:

$$\vec{J}_1 : \; |j_1 \; m_1\rangle$$

$$\vec{J}_2 : \; |j_2 \; m_2\rangle$$

· Defino $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$. $\vec{J}$ es un momento angular: (se puede ver fácilmente)

$$\vec{J} : \; |J \; M\rangle$$

me interesa hallar J, M y $|J \; M\rangle$

· $J_z |j_1 m_1 \; j_2 m_2\rangle = (J_{z_1} + J_{z_2}) |j_1 m_1 \; j_2 m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar \, |j_1 m_1 \; j_2 m_2\rangle$; $|j_1 m_1 \; j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$

es decir: $\underline{M = m_1 + m_2}$. Como $\begin{array}{l} -j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ -j_2 \leq m_2 \leq j_2 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{l} M_{max} = j_1 + j_2 \\ M_{min} = -j_1 - j_2 \end{array}$

$$\Downarrow \rightarrow M \in [-J, J]$$

$$J_{max} = j_1 + j_2$$

· Se puede demostrar que hay un J mínimo, $|j_1 - j_2|$

Ejemplo: 2 spines 1/2

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

base propia común de $S_1^2, S_2^2 S_{1z}, S_{2z}$

Quiero los autovectores de S^2, S_z. Trabajo en la base $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$

$$M_{máx} \overset{j=1/2}{=} s_1 + s_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \Rightarrow S_{máx} = 1$$

$$S_{mín} = \left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right| = 0 \Rightarrow S_{mín} = 0$$

Si S vale 1, tengo $|1\ 1\rangle$, $|1\ 0\rangle$, $|1\ -1\rangle$

Si S vale 0, tengo $|0\ 0\rangle$

La cantidad de autovectores es la misma, como debe ser

$$|1\ 1\rangle = |+\,+\rangle$$ (porque es el que tiene el $M_{máx}$)

el resto sale fácil:

$$S_-|1\ 1\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|1\ 0\rangle \Rightarrow |1\ 0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} S_-|1\ 1\rangle =$$

$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-} + S_{2-})|+\,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|-+\rangle + |+-\rangle\right]$$

$$S_-|1\ 0\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|1\ -1\rangle \Rightarrow |1\ -1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} S_-|1\ 0\rangle =$$

$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-} + S_{2-}) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle + |+-\rangle) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(0 + |--\rangle + |--\rangle + 0\right) = |--\rangle$$

$|0\ 0\rangle$: sólo puedo decir que $m_1 + m_2 = 0 \Rightarrow |0\ 0\rangle = \alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle$

$$(|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$$

pido que sea ortogonal al resto (debe serlo). En particular:

$$\langle 1\,0|0\,0\rangle = 0$$

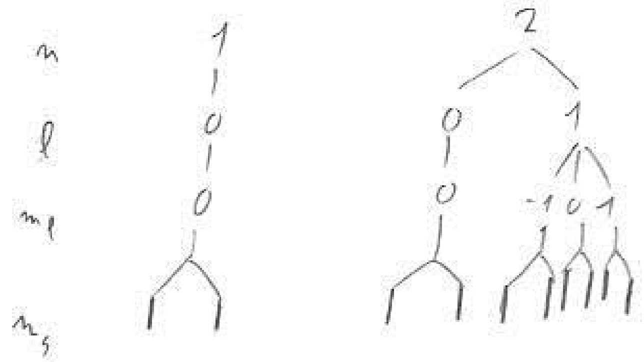
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle +-| + \langle -+|\right]\left[\alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha+\beta\right] = 0 \Rightarrow \alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

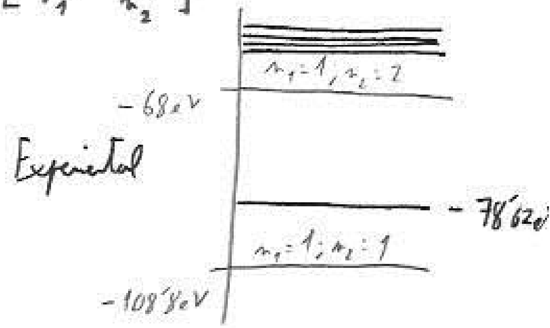
$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+-\rangle - |-+\rangle\right]$$

Así, en dos fermiones interactuantes, los estados de spin son los autoestados del spin total.

ÁTOMO DE HE

· Si no hubiera interacción entre e^-, $E = -13'6\,eV \cdot Z^2 \left[\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right]$



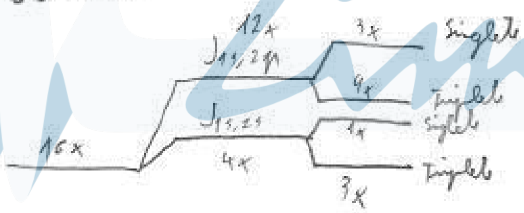


· ¿Por qué hay 4 niveles juntos?

· Fundamental: al ser los e^- idénticos, NO está degenerado. La corrección es $J_{1s,1s}$

· 1er excitado: como hay un e^- en $n=1$ y otro en $n=2$ $\Rightarrow$ 16 veces degenerado $(2\cdot 8)$

hay desdoblamiento:



$\sim 12x$ (las J) no dependen de m_ℓ por simetría, pues Z no es eje privilegiado en el eje Z)

· Vamos a hacer las cuentas:

Función de onda del He^+, hidrogenoide

$$V' = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Rightarrow J_{1s,1s} = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\iint d\vec{r}_1\, d\vec{r}_2\, |\varphi_{1s}(\vec{r}_1)|^2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}|\varphi_{1s}(\vec{r}_2)|^2 =$$

$$= \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\pi^2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^6 \iint d\vec{r}_1\, d\vec{r}_2\, e^{-\frac{2Z(r_1+r_2)}{a_0}}\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{5}{8}\frac{Z}{a_0}$$

lo hicimos a el variacional

así, $E^{(1)}_{1s,1s} = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\left[1 - \frac{5}{8}\cdot\frac{1}{Z}\right] = -74'8\,eV$, que se parece bastante al dato experimental (el variacional daba $-77'45\,eV$)

el variacional da mejor