

Sistemas de Partículas Idénticas

Pedro Velarde

Departamento de Ingeniería Energética
Instituto de Fusión Nuclear
Universidad Politécnica de Madrid

11 de abril de 2019



Sistemas de varias partículas

- ▶ Si en lugar de tener una partícula tenemos N partículas, la función de onda pasa a depender de las variables (posición o cantidad de movimiento, etc) de cada partícula

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$$

- ▶ La ecuación de Schrödinger tiene la misma estructura

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

con el Hamiltoniano H del sistema definido como

$$H = T + V = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

- ▶ La energía cinética es separable en las coordenadas de cada partícula, sin embargo el potencial V acopla las partículas, impidiendo la separación de variables.
- ▶ En muchos casos de interés el potencial tiene la estructura de suma de potencial monopartícula (aplicado individualmente a una partícula) mas términos de interacción binaria.

$$V = \sum_i V_i(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$$

- ▶ En otros casos hay que considerar interacciones ternarias (dinámica molecular) y potenciales dependientes del momento cinético (átomo y núcleo).



- ▶ Al introducir el espín, las variables de cada partícula se amplían a la coordenada de espín (índice de la componente de espín)

$$\mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{r}, \xi$$

donde $\xi = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$ indexa las $2s + 1$ coordenadas de espín.

- ▶ Por ejemplo, si la partícula n tiene espín $\frac{3}{2}$, entonces la función de onda monopartícula tiene $2s + 1 = 4$ componentes

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{r}) \\ \Phi_2(\mathbf{r}) \\ \Phi_3(\mathbf{r}) \\ \Phi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \longrightarrow \Psi(\mathbf{r}, \xi) = \Phi_\xi(\mathbf{r}) \quad \text{con } \xi = 1, 2, 3, 4$$

- ▶ Cada partícula puede tener más variables que la posición y (proyección de) espín. De forma genérica nos referiremos a las variables de cada partícula por el índice de la partícula

$$\Psi(\mathbf{r}_n, \xi_n, \dots) \equiv \Psi(n)$$

esto en ocasiones simplifica la notación.

- ▶ En general cada partícula tendrá alguna constante distinta de las otras (masa, carga, espín), en este caso decimos que son distinguibles.



Partículas idénticas en Mecánica Clásica

- ▶ Cuando todas las constantes de cada partícula coinciden, estamos ante el caso de partículas idénticas, y el formalismo para tratar dichos sistemas es diferente del caso de partículas distinguibles, y radicalmente diferente del caso clásico.
- ▶ En mecánica clásica, la ley de Newton afirma que las aceleraciones \mathbf{a} sólo pueden depender explícitamente del tiempo, de la posición y de la velocidad.

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{a}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

Por lo tanto, dadas en un instante de tiempo la posición y velocidad de una partícula, la trayectoria de ésta queda determinada, y en cualquier momento podemos saber cual será su posición en el futuro o cuál fue su posición en el pasado.

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}(t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$$

- ▶ Si tenemos un conjunto de partículas, y sabemos su posición y velocidad en un instante de tiempo determinado, pongamos $t=0$, entonces podemos determinar la trayectoria de todas ellas.
- ▶ Para saber qué partícula es la que en un tiempo t ocupa cierta posición, basta retroceder a $t = 0$ y ver cuál era su posición y velocidad en ese instante. Por lo tanto en mecánica clásica las partículas, cualesquiera que sean sus propiedades intrínsecas, son siempre *distinguibles*.



Partículas Idénticas en MC

- ▶ En mecánica cuántica el concepto de trayectoria no existe
- ▶ No existe por lo tanto aparato de medida ni podemos construir un observable derivado de la mecánica clásica que distinga entre dos partículas idénticas en mecánica cuántica.

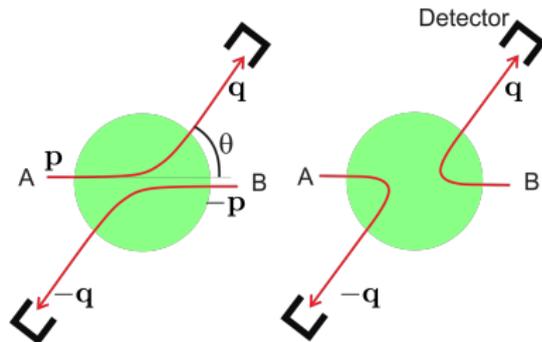


Figura: Caso descriptivo de la interacción de dos partículas idénticas, con y sin intercambio durante la interacción. Las dos posibilidades son indistinguibles.

- ▶ En la figura de arriba, los estados iniciales de las dos partículas son

$$\Psi(t = -\infty) = \phi_p(1)\phi_{-p}(2)$$

siendo las funciones de onda ϕ_p las de partícula libre con cantidad de movimiento $p\mathbf{e}_x$



- ▶ Las dos posibilidades del estado final son

$$\phi_q(1)\phi_{-q}(2) \quad \text{o también} \quad \phi_{-q}(1)\phi_q(2)$$

con $\mathbf{q} = q(\cos \theta \mathbf{e}_x + \sin \theta \mathbf{e}_y)$, y por lo tanto cabría esperar que el estado final será una combinación de los dos anteriores

$$\Psi(t = \infty) = \cos \alpha \phi_q(1)\phi_{-q}(2) + \sin \alpha \phi_{-q}(1)\phi_q(2)$$

con α arbitrario. Por lo tanto las amplitudes de transición dependen de α



Otro Ejemplo

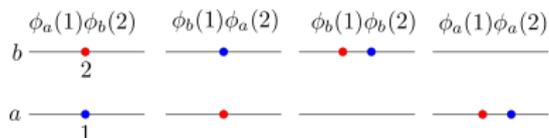


Figura: Caso descriptivo de la interacción de dos partículas idénticas, con y sin intercambio durante la interacción. Las dos posibilidades son indistinguibles.

Si tenemos dos partículas, numeradas 1 y 2, y dos estados, indexados con a y b , tenemos 4 posibilidades según la figura. Si las partículas son distinguibles (colores rojo y azul en la figura) entonces podemos determinar cuál está en qué estado, y las combinaciones son cuatro

$$\Psi = \phi_a(1)\phi_b(2)$$

$$\Psi = \phi_b(1)\phi_a(2)$$

$$\Psi = \phi_b(1)\phi_b(2)$$

$$\Psi = \phi_a(1)\phi_a(2)$$



Otro Ejemplo

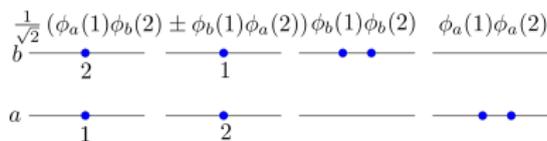


Figura: Caso descriptivo de la interacción de dos partículas idénticas indistinguibles.

- ▶ Si las partículas son idénticas (colores iguales en la figura) entonces no podemos distinguir cuál está en qué estado, y las combinaciones son tres, siendo los dos primeros casos idénticos

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_a(1)\phi_b(2) \pm \phi_b(1)\phi_a(2))$$

$$\Psi = \phi_b(1)\phi_b(2)$$

$$\Psi = \phi_a(1)\phi_a(2)$$



Espacio E_N de N partículas idénticas

- ▶ El espacio E_N de N partículas se construye a partir del de una partícula (monopartícula) E_1 por producto

$$E_N = E_1 \otimes \dots \otimes E_1$$

- ▶ Una base \mathcal{B}_N de E_N puede fabricarse a partir una base \mathcal{B}_1 de E_1 (estados monopartícula)

$$\phi_{abc\dots}(1, 2, 3, \dots) = \phi_a(1)\phi_b(2)\phi_c(3)\dots$$

y cualquier permutación de este producto de estados monopartícula también valdría. Esta elección de base \mathcal{B}_N es una de las muchas posibilidades, y la mas utilizada en la práctica.

- ▶ A pesar de que los elementos de \mathcal{B}_N son productos de elementos de \mathcal{B}_1 , la combinación lineal de ellos no puede expresarse generalmente como producto de funciones de E_1 , es decir

$$\Psi(1, 2, 3, \dots) = \sum_{abc\dots} \phi_a(1)\phi_b(2)\phi_c(3)\dots \neq \Psi_1(1)\Psi_2(2)\dots$$



Transposiciones

- ▶ Si tenemos dos partículas idénticas y cambiamos una por otra, ninguna propiedad observable queda afectada.
- ▶ La acción de cambiar una partícula por otra la expresamos por el operador transposición T_{ij} , definido como el operador que intercambia los estados de las partículas i y j , es decir:

$$T_{ij}\Psi_{a_1\dots a_N}(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \Psi_{a_1\dots a_N}(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N)$$

- ▶ El mismo efecto se obtiene cambiando *estados* en lugar de *partículas*

$$T_{ij}\Psi_{a_1\dots a_i\dots a_j\dots a_N}(1, \dots, N) = \Psi_{a_1\dots a_j\dots a_i\dots a_N}(1, \dots, N)$$

Esta notación es la preferida.

- ▶ Si aplicamos dos veces T_{ij} obtenemos el vector inicial, así que $T_{ij}^2 = I$.
- ▶ Una transposición es un operador hermítico, como puede comprobarse inspeccionando los elementos de matriz en una base ortonormal arbitraria:

$$\begin{aligned}\langle a_1, a_2 | T | b_1, b_2 \rangle &= \langle a_1, a_2 | b_2, b_1 \rangle = \langle a_1 | b_2 \rangle \langle a_2 | b_1 \rangle = \langle a_2, a_1 | b_1, b_2 \rangle \\ &= \langle a_1, a_2 | T^+ | b_1, b_2 \rangle\end{aligned}$$

y $T = T^+$ al ser iguales sus elementos de matriz.



Permutaciones

- ▶ Consideremos una permutación $\alpha = \{i_1, \dots, i_N\}$ de $\{1, 2, \dots, N\}$, por ejemplo, la permutación 231 es la que cambia la secuencia (1, 2, 3) por (2, 3, 1).
- ▶ El operador P_α que cambia los estados de cada partícula k por el de i_k , con $k = 1, \dots, N$, se denomina operador *permutación*.
- ▶ Una permutación siempre se puede descomponer en producto de transposiciones, pero esta descomposición no es única.
- ▶ Si asignamos a un producto de m transposiciones el valor $(-1)^m$, entonces puede demostrarse que este valor es único para cada permutación sea cual sea la descomposición en transposiciones que se realice.
- ▶ Llamaremos a dicho número signo de la permutación y lo representaremos por ϵ_α .
- ▶ De todas las combinaciones lineales posibles de permutaciones, existen dos de especial utilidad, a saber, el simetrizador S y el antisimetrizador A , definidos por

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

donde la suma se extiende a todas las permutaciones α posibles de $\{1, 2, \dots, N\}$.



Invariancia de S y A

- ▶ La acción de una permutación arbitraria P_β sobre S es

$$P_\beta S = \frac{1}{N!} \sum_\alpha P_\beta P_\alpha = \frac{1}{N!} \sum_\gamma P_\gamma = S \quad (1)$$

dado que $P_\beta P_\alpha$ será otra permutación de la suma, luego la acción de P_β es reordenar la suma.

- ▶ La acción de P_β sobre A es

$$P_\beta A = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\beta P_\alpha = \epsilon_\beta \frac{1}{N!} \sum_\alpha \epsilon_\alpha \epsilon_\beta P_\beta P_\alpha = \epsilon_\beta \frac{1}{N!} \sum_\gamma \epsilon_\gamma P_\gamma = \epsilon_\beta A$$

- ▶ De lo anterior se deduce que S y A conmutan con cualquier permutación, a pesar de ser suma de permutaciones que no conmutan entre sí.
- ▶ Sumando (1) y (2) para todas las permutaciones, tenemos

$$\begin{aligned} S^2 &= S \\ A^2 &= A \end{aligned} \quad (2)$$

S y A conmutan con cualquier permutación.



Aplicación consecutiva de A y S

- ▶ Intentar simetrizar un estado totalmente antisimétrico da lugar siempre a un estado nulo

$$AS = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} P_{\alpha} S = \frac{1}{N!} \left(\sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \right) S = 0$$

ya que de las $N!$ permutaciones, la mitad tienen signo negativo. \dot{i}

- ▶ De igual forma se obtiene $SA = 0$.
- ▶ Con esta propiedad y (2) se obtiene una descomposición del espacio E_N de N partículas

$$E_N = E_1 \otimes \dots \otimes E_1 = E_S \oplus E_A \oplus E_R$$

donde E_S se obtiene aplicando S a todos los kets (vectores) de E_N , E_A aplicando A y E_R siendo el resto sin simetría definida.

- ▶ Observar que los elementos de la base de E_S son una combinación lineal de los elementos de la base de E_N , y por lo tanto no se pueden expresar como productos de vectores de E_1 , en otras palabras, no existen Ψ_{b_i} pertenecientes a E_1 tal que

$$\Psi_{b_1, \dots, b_N} = \sqrt{N!} A \Psi_{a_1, \dots, a_N}$$



Problemas asociados a partículas idénticas

Resumiendo, tenemos dos problemas principales asociados al tratamiento de partículas idénticas

1. Las amplitudes de transición $\langle a|\Psi\rangle$ dependen de parámetros arbitrarios, haciendo imposible la interpretación de Born $|\langle a|\Psi\rangle|^2$ como una probabilidad de transición
2. Si B es un operador de N partículas idénticas, entonces conmuta con cualquier permutación

$$[B, P_\alpha] = 0$$

La ecuación de valores propios de B sería

$$B\phi_b = b\phi_b$$

lo que nos da

$$P_\alpha B\phi_b = bP_\alpha\phi_b$$

Aplicando la conmutación de B y P_α tenemos

$$BP_\alpha\phi_b = bP_\alpha\phi_b$$

es decir, $P_\alpha\phi_b$ es siempre un vector propio, independiente de ϕ_b , con el mismo valor propio. Esto implica que nunca podemos conseguir una sola función propia para preparar un estado bien definido, rompiendo el postulado de la medida.



Postulado de simetrización

- ▶ Para cada ket Ψ_a de E_N , al aplicar S al conjunto de $N!$ elementos $\{P_\alpha \Psi_a, \text{ para todo } \alpha\}$, se obtiene siempre el mismo elemento.
- ▶ Por lo tanto la aplicación de permutación deja invariantes a los elementos de E_S y E_A (únicamente).
- ▶ Una elección única de estados en E_N sería obligar a que éstos fueran o totalmente simétricos o totalmente antisimétricos.



Postulado de Simetrización

Postulado VIII de Simetrización: *Los kets estado de un sistema de N partículas idénticas han de ser o totalmente simétricos o totalmente antisimétricos.*



Postulado de Simetrización

- ▶ Por lo tanto, de las $N!$ posibilidades que existen para un ket determinado en un sistema de N partículas idénticas, sólo son físicamente aceptables el ket o totalmente simétrico o totalmente antisimétrico.
- ▶ En teoría cuántica de campos se demuestra bajo hipótesis muy generales
 - ▶ Los estados *simétricos* corresponden a partículas de espín entero, dándoles el nombre de *bosones*.
 - ▶ Los estados *antisimétricos* corresponden a partículas con espín semientero, y reciben el nombre de *fermiones*.
- ▶ Dado que ningún observable puede modificar la simetría de un estado simétrico o antisimétrico, una partícula ha de ser necesariamente un bosón o un fermión.



Efectos del Postulado de Simetrización

- ▶ El postulado de simetrización permite elegir de todos los estados posibles del sistema, uno en concreto de acuerdo con el espín de las partículas, resolviendo el problema de la medida comentado al principio de este capítulo.
- ▶ El espín es, como la masa en reposo o la carga, propiedades que definen a una partícula, y no dependen del proceso concreto bajo estudio.
- ▶ Igualmente la degeneración por intercambio desaparece al escoger estados simétricos o antisimétricos. En efecto, si Q es un observable entonces la elección de Ψ_{qS} y Ψ_{qA} es única

$$P_{\alpha}\Psi_{qS} = P_{\alpha}S\Psi_q = S\Psi_q = \Psi_{qS}$$

por lo que $P_{\alpha}\Psi_{qS}$ y Ψ_{qS} son colineales, y desaparece la degeneración por intercambio.



Ejemplos

- ▶ Ejemplos de fermiones son el electrón, protón, neutrón y neutrino.
- ▶ Ejemplos de bosones son el fotón y en general todas las partículas que median en un campo.
- ▶ El protón está compuesto a su vez de otras partículas (quarks), y cabe preguntarse cómo se tratan agregados de partículas ya sean idénticas o no.
- ▶ Un agregado de bosones será siempre un bosón, ya que la suma de enteros es un entero.
- ▶ Un agregado de fermiones será un bosón o fermión dependiendo de si está compuesto de un número par o impar de fermiones.
- ▶ El Hidrógeno y Tritio son bosones, y el deuterio es un fermión. El ^3He es un fermión, pero el ^4He es un bosón.



Observables de N partículas idénticas

- ▶ Como ya hemos visto, todos los observables Q ha de conmutar con cualquier permutación P_α y por lo tanto han de ser completamente simétricos.
- ▶ Observables aceptables serían

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \sum_i \mathbf{P}_i \\ \mathbf{L} &= \sum_i \mathbf{L}_i \\ V(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) &= \sum_{i,j} W(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)\end{aligned}$$

- ▶ Observables no aceptables serían

$$Q(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$$



Operadores no observables

Veamos más detalladamente este caso. Una forma de ver que Q no conmuta con todas las transposiciones, es por inspección directa de los elementos de matriz de TQ y QT en la representación R y comprobar que son distintos. El elemento de matriz en la representación R de Q es

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | Q | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 \rangle = Q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2)$$

y los de TQ y QT son

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | QT | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 \rangle = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | Q | \mathbf{r}'_2, \mathbf{r}'_1 \rangle = Q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_2) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1)$$

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | TQ | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 \rangle = \langle \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 | Q | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 \rangle = Q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_2)$$

y como $Q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -Q(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ los dos elementos de matriz son distintos.



Simetrización

- ▶ La combinación lineal y producto de observables es un observable en E_N
- ▶ En general, un observable de E_N que no sea simétrico puede simetrizarse aplicando el operador S dando lugar a un observable de E_N .
- ▶ Los valores propios no se modifican al simetrizar o antisimetrizar los vectores propios, ya que si $\Psi_q = \Psi_{q_1, \dots, q_N}$ es un ket propio de Q con valor propio q , entonces $S\Psi_q$ es vector propio de Q con el mismo valor propio.



Principio de exclusión de Pauli

- ▶ Inspeccionando la expresión del antisimetrizador, vemos que la suma es el desarrollo de un determinante cuyos elementos son los pares estado-partícula.
- ▶ Expresado de otra forma

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} A\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} P_{\alpha} \Psi_{u_1}(1) \Psi_{u_2}(2) \Psi_{u_3}(3) \dots \Psi_{u_N}(N)$$

puede colocarse en forma de determinante

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{u_1}(1) & \dots & \Psi_{u_1}(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \Psi_{u_N}(1) & \dots & \Psi_{u_N}(N) \end{vmatrix} \quad (3)$$

- ▶ Si dos las partículas 1 y 2 comparten el mismo estado u_1 , entonces

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} P_{\alpha} \Psi_{u_1}(1) \Psi_{u_1}(2) \Psi_{u_3}(3) \dots \Psi_{u_N}(N)$$

esto es equivalente a sustituir en (3) u_2 por u_1 , dando las dos primeras filas iguales, y anulándose así el determinante.

- ▶ Esto nos lleva al *principio de exclusión de Pauli*: En sistema de fermiones no puede haber dos partículas en el mismo estado.



Estado fundamental de bosones

- ▶ Consideremos primeramente un sistema de N bosones que no interaccionan entre sí. Al no haber potencial de interacción, el Hamiltoniano del sistema es la suma de los Hamiltonianos monopartícula

$$H = H_o(1) + \dots + H_o(N)$$

donde $H_o(i)$ es el operador Hamiltoniano que actúa sobre la partícula i .

$$H_o = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})$$

el Hamiltoniano que aplica sobre cada partícula.

- ▶ Suponemos E_1, E_2, \dots los valores propios (energías) de H_o ordenados en orden creciente.
- ▶ La acción de $H_o(i)$ sobre un ket formado con productos de kets propios Ψ_{E_k} de H_o daría

$$H_o(k)\Psi_{E_1, \dots, E_N} = \Psi_{E_1} \dots (H_o\Psi_{E_k}) \dots \Psi_{E_N} = E_k\Psi_{E_1, \dots, E_N}$$

- ▶ La energía del sistema es

$$H\Psi_{E_1, \dots, E_N} = (E_1 + \dots + E_N)\Psi_{E_1, \dots, E_N}$$



Estado fundamental de bosones (cont)

- ▶ Como un bosón puede ocupar cualquier estado independientemente de los otros, el estado fundamental o de más baja energía será aquel en el que cada partícula tiene la energía mínima E_1 , por lo tanto

$$E_o = \frac{\text{Energía del estado}}{\text{fundamental}} = N E_1$$

- ▶ La función de onda simetrizada sería

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \dots N_M! N!}} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \Psi_{u_1}(1) \Psi_{u_1}(2) \Psi_{u_3}(3) \dots \Psi_{u_N}(N)$$

siendo M el número de estados distintos.



Estado fundamental de fermiones

- ▶ El caso de fermiones es distinto. Imaginemos que partimos de un fermión en el estado fundamental E_1 y añadimos otro fermión al sistema.
- ▶ Suponemos $E_1 \leq E_2 \leq \dots$ y espectro discreto por simplicidad.
- ▶ Al estar ocupado el nivel E_1 la siguiente partícula ha de ir al nivel E_2 , y así sucesivamente se irían llenando los niveles desde el de más baja energía.
- ▶ De esta forma la energía del estado fundamental de un sistema de N fermiones sería

$$E_o = E_1 + E_2 + \dots + E_N$$

- ▶ Cada fermión que añadimos ha de ir a un nivel de energía superior, provocando que la energía del sistema aumente más rápidamente que N .



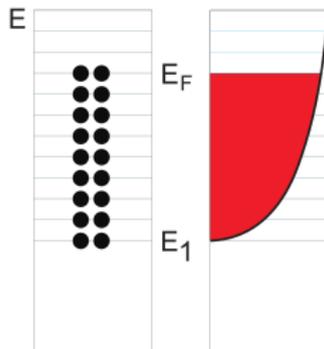


Figura: Esquema de llenado de niveles por fermiones.



Ejemplo del efecto del postulado de simetrización: Separación entre dos partículas

Hemos visto que el operador posición relativa definido en (3) no es un observable, pero la separación $(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2$ sí es simétrico y por lo tanto observable del sistema de dos partículas idénticas. Veamos cuál es la separación media de dos partículas en estados a y b . El ket estado de dicho sistema será:

$$\Psi_\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (I \pm T) \Psi_{a,b}$$

siendo el signo $+$ para bosones y el $-$ para fermiones. La distancia media vendrá dada por

$$\begin{aligned} \langle \psi | (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2 | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \langle a, b | (I \pm T) (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2 (I \pm T) | a, b \rangle \\ &= \langle a, b | (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2 (I \pm T) | a, b \rangle \\ &= \langle a, b | (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2 | a, b \rangle \pm \langle a, b | (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2 | b, a \rangle \\ &\quad \quad \quad (A) \quad \quad \quad (B) \end{aligned}$$

donde en la segunda igualdad se ha aplicado la conmutación de T con cualquier observable. El término (A) sería el de esperar si las dos partículas fueran distinguibles, y el término (B) es siempre negativo o nulo. En efecto, desarrollando el cuadrado en (B) tenemos:

$$\begin{aligned} (B) &= \langle a, b | (\mathbf{R}_2)^2 | b, a \rangle + \langle a, b | (\mathbf{R}_1)^2 | b, a \rangle - 2 \langle a, b | \mathbf{R}_2 \cdot \mathbf{R}_1 | b, a \rangle \\ &= \langle a | b \rangle \langle b | (\mathbf{R}_2)^2 | a \rangle + \langle a | (\mathbf{R}_1)^2 | b \rangle \langle b | a \rangle - 2 \langle a | \mathbf{R} | b \rangle \langle b | \mathbf{R} | a \rangle \end{aligned}$$



Separación media

los dos primeros términos de la última igualdad son nulos al ser a y b estados ortogonales. El último término es $-2 |\langle a | \mathbf{R} | b \rangle|^2$, que es siempre negativo. Uniendo estos resultados obtenemos una separación media

$$\langle \psi | (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2 | \psi \rangle = \langle a, b | (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)^2 | a, b \rangle \mp 2 |\langle a | \mathbf{R} | b \rangle|^2$$

de donde deducimos que dos bosones (signo negativo) tiene una distancia entre partículas menor o igual que si fueran dos fermiones. El caso de partículas distinguibles estaría entre medias de los dos anteriores. En todo el cálculo no se ha aplicado ningún campo a las partículas, así que esta diferencia de distancias entre bosones y entre fermiones es debida exclusivamente al tipo de partícula, sin mediar campo alguno.



Efecto en las secciones eficaces

La simetrización de los kets estado tiene influencia directa en numerosas magnitudes. A modo de ejemplo consideremos el caso de la dispersión esquematizada en la figura 3.1. La sección eficaz diferencial, magnitud que nos mide la probabilidad de dispersión a cierto ángulo, se puede expresar de la forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

para partículas distinguibles. Aquí $f(\theta)$ es proporcional al módulo de la función del onda de las partículas emergentes. Si las partículas son distinguibles pero no medimos cuál llega a cada detector, entonces, por simetría, la sección eficaz es un promedio de las dos posibilidades esquematizadas en la fig.??

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2$$

Pero si las partículas son indistinguibles, entonces el promedio hay que hacerlo en la función de onda, dando lugar a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \pm 2\text{Re}(f(\theta)f(\pi - \theta)^*)$$

donde el signo + es para bosones y el negativo para fermiones. Este término es el típico de interferencia que aparece en la propagación de ondas, y da lugar a oscilaciones en la sección eficaz (ver fig.5)



Sección eficaz de dispersión $C - C$

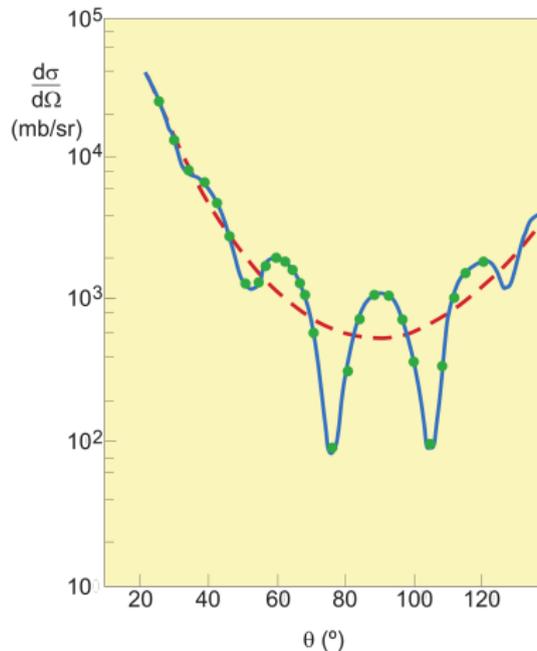


Figura: Sección eficaz diferencial de dispersión de dos átomos de carbono-12, donde la línea a trazos es el resultado clásico de partículas indistinguibles, y el trazo continuo es el caso cuántico de partículas indistinguibles. Los círculos son puntos experimentales.



En el caso de la figura dos átomos de ^{12}C (bosones) colisionan con una energía cinética de 5 MeV respecto al centro de masas, dando lugar a una dispersión Coulombiana. Se puede demostrar que el factor f que aparece en la expresión de la sección eficaz es

$$f(\theta) = -\frac{\gamma}{2k \sin^2(\theta/2)} \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \exp \{ -i\gamma \log [\sin^2(\theta/2)] \}$$

donde $\gamma = \frac{mZ^2q^2}{\hbar^2k}$ y $k = \hbar^{-1}mv$ siendo v la velocidad de las partículas en el centro de masas. Esto da lugar a una sección eficaz diferencial de

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{\gamma}{2k} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} + \frac{2 \cos \{2\gamma \log [\tan(\theta/2)]\}}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right]$$



Modelo simple de conducción: Electrones en una Caja

- ▶ Este es un ejemplo clásico de la utilización del postulado de simetrización
- ▶ Vamos a calcular varias magnitudes asociadas a un sistema de N electrones sin interacción mutua sometidos a un potencial tipo caja de tamaño L
- ▶ Los niveles de energía y funciones de onda espaciales monopartícula de la caja son

$$E_r = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} r^2 \quad \text{para } r = 1, 2, 3, \dots$$
$$\phi_r(x) = \sqrt{2/L} \operatorname{sen}(r\pi x/L)$$

- ▶ Para cada energía hay dos posibilidades de proyección de espín (*up* y *down*), con vectores propios α y β
- ▶ La función de onda monopartícula será el producto de la parte espacial por la de espín. Por ejemplo (aplicado individualmente a una partícula) mas términos de interacción binaria.

$$\psi_{3-}(1) = \phi_3(x_1)\beta \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_3(x_1) \end{pmatrix}$$



Electrones en una Caja: Caso de tres partículas

- ▶ Para un solo electrón el estado del sistema será $\phi_1(x_1)\alpha$ (o β)
- ▶ Para dos electrones tenemos $\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)(\alpha\beta - \beta\alpha)$
- ▶ Para tres electrones hay que realizar las seis combinaciones de partículas-estados

$$\begin{array}{cc} P & E \\ 1 & a \\ 2 & b \\ 3 & c \end{array} \rightarrow \begin{array}{cc} P & E \\ 1 & b \\ 2 & a \\ 3 & c \end{array} \rightarrow \begin{array}{cc} P & E \\ 1 & b \\ 2 & c \\ 3 & a \end{array} \rightarrow \begin{array}{cc} P & E \\ 1 & c \\ 2 & b \\ 3 & a \end{array} \rightarrow \begin{array}{cc} P & E \\ 1 & c \\ 2 & a \\ 3 & b \end{array} \rightarrow \begin{array}{cc} P & E \\ 1 & a \\ 2 & c \\ 3 & b \end{array}$$

con los estados

$$\begin{array}{ll} a & \phi_1\alpha \\ b & \phi_1\beta \\ c & \phi_2\alpha \end{array}$$

- ▶ Por ejemplo, la última transposición sería

$$\psi_{acb}(1, 2, 3) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_1(x_3)\alpha\alpha\beta \equiv \phi_1\phi_2\phi_1\alpha\alpha\beta$$



Electrones en una Caja: Caso de tres partículas

- ▶ La función de onda para el estado fundamental de tres electrones en una caja sería

$$\psi_{123}(1, 2, 3) = \frac{1}{Z} (\quad \phi_1\phi_1\phi_2\alpha\beta\alpha - \phi_1\phi_1\phi_2\beta\alpha\alpha + \phi_1\phi_2\phi_1\beta\alpha\alpha - \\ - \quad \phi_2\phi_1\phi_1\alpha\beta\alpha + \phi_2\phi_1\phi_1\alpha\alpha\beta - \phi_1\phi_2\phi_1\alpha\alpha\beta)$$

- ▶ Con $Z = \sqrt{3!}$.
- ▶ La energía total del sistema es $E = 2E_1 + E_2$



Electrones en una Caja: Caso de N partículas

- ▶ Para el caso de N electrones tenemos

$$\psi_{12..N}(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\text{Permutaciones}_\alpha} \epsilon_\alpha P_\alpha(\phi_{1\alpha})(\phi_{1\beta}) \cdots (\phi_{m\alpha})(\phi_{m\beta})$$

siendo m el último nivel ocupado por los electrones ($m = E(N/2)$ en 1D) y le corresponde una energía, llamada Energía de Fermi

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\pi^2}{L^2} m^2$$

y la energía total del sistema

$$E = 2 \sum_{r=1}^m E_r = \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{\pi^2}{L^2} \sum r^2 = \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{\pi^2}{L^2} \frac{1}{3} m(m+1)(m + \frac{1}{2})$$

siendo el factor 2 las dos posibilidades de proyección de espín por cada nivel de energía.



Electrones en una Caja: Energía del sistema cuando $N \gg 1$ en 1D

- ▶ Para el caso de un valor grande del número de partículas, podemos sustituir la suma por integrales de acuerdo con $\sum_1^m f(n) \approx \int_0^m f(x)dx$, obteniendo

$$N = 2 \sum_1^m 1 = 2m$$

$$E = 2 \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\pi^2}{L^2} \sum_1^m r^2 \approx \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{\pi^2}{L^2} \frac{1}{3} m^3$$

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\pi^2}{L^2} m^2$$

- ▶ Teniendo en cuenta que el *Volumen* $V = L$ y llamando a la densidad (lineal) numérica de electrones $n = N/V$

$$E = \frac{\hbar^2}{3m_e} \frac{\pi^2}{L^2} (N/2)^3 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{24m_e} N n^2$$

$$E_f = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m_e} n^2$$

es decir

$$E = \frac{\hbar^2}{3m_e} \frac{\pi^2}{L^2} (N/2)^3 = \frac{1}{3} N E_f$$



Electrones en una Caja: Energía del sistema cuando $N \gg 1$ en 3D

- ▶ En 3D las sumas no son tan directas ya que recorren todos los índices (enteros positivos) n_x, n_y y n_z con la restricción $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq m^2$

$$N = 2 \sum_{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq m^2} 1 \approx 2 \frac{1}{8} 4\pi \int_0^m r^2 dr = \frac{\pi}{3} m^3$$

$$E = 2 \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\pi^2}{L^2} \sum_{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq m^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\approx \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{\pi^2}{L^2} \frac{1}{8} 4\pi \int_0^m r^4 dr = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10m_e L^2} m^5$$

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\pi^2}{L^2} m^2$$

- ▶ Teniendo en cuenta que el Volumen $V = L^3$ y llamando a la *densidad numérica* de electrones $n = N/V$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10m_e V^{2/3}} (3N/\pi)^{5/3}$$

$$E_f = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e} (3/\pi)^{2/3} n^{2/3}$$

es decir

$$E = \frac{3}{5} N E_f$$



Presión del sistema cuando $N \gg 1$ en 3D

- ▶ La presión ejercida por los electrones sobre la pared de la caja es $p = -(dE/dV)_N$ y en términos de ρ

$$P = -N \left(\frac{dE_f}{dV} \right)_N = \frac{2}{5} N \frac{1}{V} E_f = an^{\frac{5}{3}}$$

$$B = -V \frac{dP}{dV} = \frac{5}{3} P = 0,39 \left(\frac{n}{\text{nm}^{-3}} \right)^{\frac{5}{3}} \text{ GPa}$$

donde $a = \frac{\hbar^2}{5m_e} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}}$, P es la presión y B es el módulo de compresibilidad.

- ▶ Por ejemplo, el Mg, con $n = 8,6 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$, el valor de B calculado es $6,5 \times 10^{10} \text{ Nm}^{-2}$ y el experimental es $4,5 \times 10^{10} \text{ Nm}^{-2}$
- ▶ Para algunos elementos tenemos

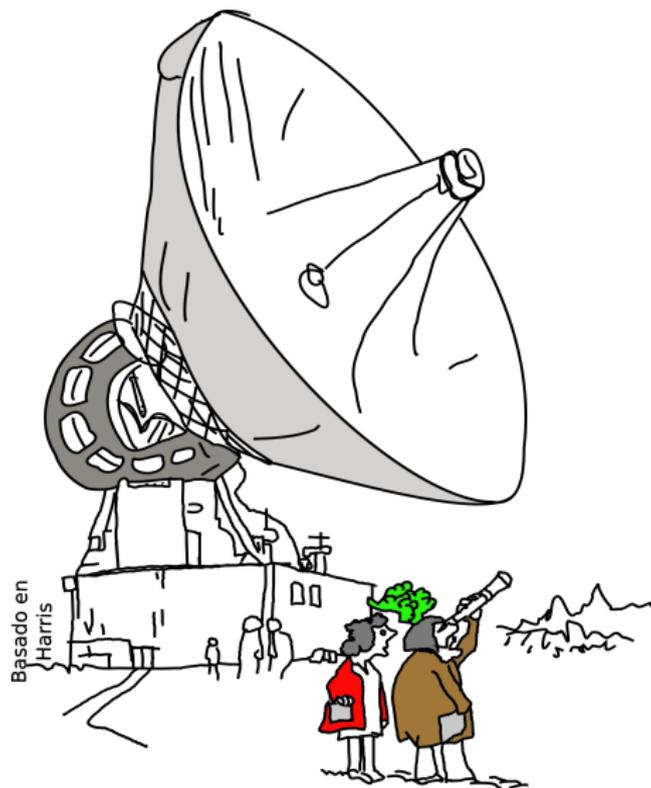
Metal	E_f eV	v_f 10^6 m/s	T_f 10^4 K
Cu	7.1	1.6	8.2
Li	4.7	1.3	5.5
Ag	5.5	1.4	6.4
Na	3.1	1.1	3.7



Estabilidad de la Materia

- ▶ El teorema del virial aplicado a un sistema de cargas da como resultado que la energía del estado fundamental E_0 es siempre negativa (así como el resto de valores) $E_0 = -\langle T \rangle$
- ▶ Dyson y Lenard (1967), y mas tarde Lieb y Thirring (1976), demostraron para un sistema de fermiones con carga la estabilidad H , es decir, que la energía del estado fundamental de un sistema de fermiones con carga E_0 verifica $E_0 > -CN$. En particular se tiene para electrones que $C = 23 \text{ Ry}$.
- ▶ Para un sistema formado por bosones con carga, Dyson y Lenard (1967) demostraron que no es estable H , ya que $-AN_e^{\frac{5}{3}} \leq E_0 \leq -BN_e^{\frac{7}{3}}$
- ▶ También puede demostrarse que la energía libre por unidad de volumen de un sistema neutro de electrones y iones interaccionando con un potencial Coulombiano tiene la forma asintótica a bajas densidades de un sistema de partículas sin interacción





Sólo estoy chequeando ...



Módulo de Compresibilidad

Nombre	Z	A	Bexp GPa	Bth GPa	ρ kg/m ³	V	n 1/nm ³	r_s/a_0	E_f eV
Sodio	11	23	6.3	8.5	968	1	25.4	4	3.1
Magnesio	12	24.3	45	65.4	1738	2	86.1	2.7	7.1
Potasio	19	39.1	3.1	2.9	856	1	13.2	5	2
Calcio	20	40.1	17	23.5	1550	2	46.6	3.3	4.7
Escandio	21	45	57	113.7	2985	3	120	2.4	8.9
Manganeso	25	54.9	120	191	7470	2	163.8	2.1	10.9
Hierro	26	55.8	170	202.9	7874	2	169.8	2.1	11.2
Nikel	28	58.7	180	229.4	8908	2	182.8	2.1	11.7
Zinc	30	65.4	70	132.4	7140	2	131.5	2.3	9.4
Rubidio	37	85.5	2.5	2.1	1532	1	10.8	5.3	1.8
Itrio	39	88.9	41	71.6	4472	3	90.9	2.6	7.4
Cadmio	48	112.4	42	73.9	8650	2	92.7	2.6	7.5
Cesio	55	132.9	1.6	1.4	1879	1	8.5	5.7	1.5
Bario	56	137.3	9.6	11.8	3510	2	30.8	3.7	3.6
Samario	62	150.4	38	68.3	7353	3	88.3	2.6	7.2
Gadolinio	64	157.2	38	71.4	7901	3	90.8	2.6	7.4
Terbio	65	158.9	38.7	74.9	8219	3	93.4	2.6	7.5
Disprobio	66	162.5	41	77.1	8551	3	95.1	2.6	7.6
Holmio	67	164.9	40	78.9	8795	3	96.3	2.6	7.7
Erbio	68	167.3	44	81	9066	3	97.9	2.5	7.7
Tulio	69	168.9	45	83.5	9321	3	99.7	2.5	7.8
Iterbio	70	173	31	44.8	6570	3	68.6	2.9	6.1
Lutecio	71	175	48	86.2	9841	3	101.6	2.5	7.9



Módulo de Compresibilidad B Teórico y Experimental

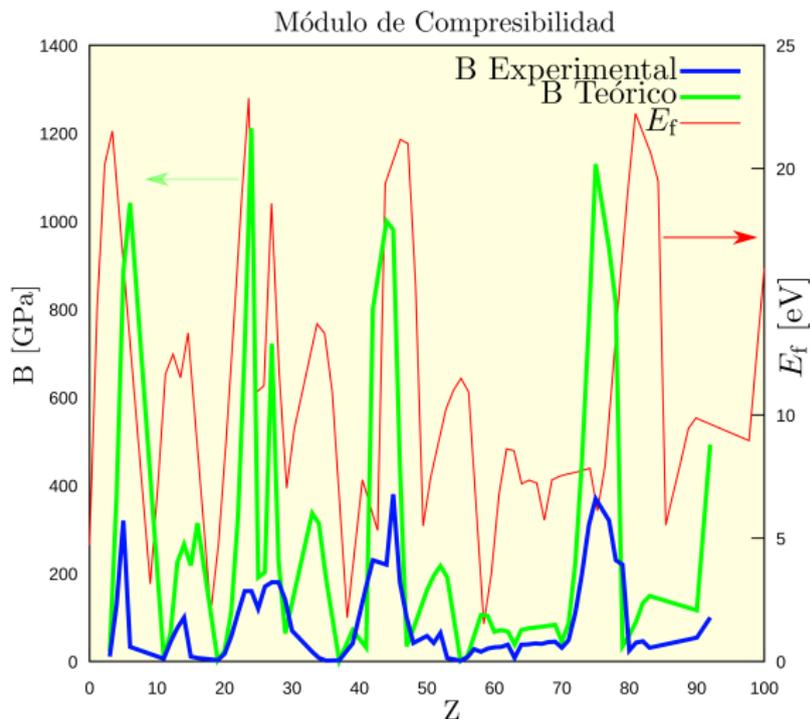


Figura: Comparación de B experimental con la obtenida con el modelo de gas de electrones



