Partículas Idênticas (I)

Sistemas de Duas Partículas

O estado de 2 partículas é descrito por uma função de onda

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

Obedecendo a equação de Schrödinger

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

onde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

É o hamiltoniano mais geral, e ∇_1^2 é o laplaciano atuando na coordenada $\vec{r}_1$, e ∇_2^2 atua na coordenada $\vec{r}_2$ da partícula 2.

A função de onda do sistema está normalizada de acordo com

$$\int |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 \, d^3r_1 \, d^3r_2 = 1$$

onde

$$|\Psi(\vec{r}_1;\vec{r}_2,t)|^2 d^3 r_1\, d^3 r_2$$

é a probabilidade de achar a partícula 1 em $\vec{r}_1$ e de (ao mesmo tempo t) achar a partícula 2 em $\vec{r}_2$.

Se o potencial V não depende de t então temos que as soluções (auto estados de H) são

$$\Psi(\vec{r}_1;\vec{r}_2,t) = \psi(\vec{r}_1;\vec{r}_2)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

=> estados estacionários de energia E, a energia total do sistema.

Neste caso, temos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\vec{r}_1;\vec{r}_2)\right)\psi(\vec{r}_1\vec{r}_2) = E\,\psi(\vec{r}_1;\vec{r}_2)$$

Resolver essa equação no caso mais geral é difícil. Porem, existem casos nos quais a solução se simplifica. Eles podem ser obtidos, em geral, como aproximações do caso geral em alguns circunstâncias.

Em particular, consideremos duas partículas não interagentes. I.e.:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2)$$

$\Rightarrow$ Não tem efeitos de uma sobre a outra. Por exemplo, eles estão sujeitos aos efeitos de um campo externo.

Neste caso podemos resolver a eq. de Schrödinger por separação de variáveis:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_b(\vec{r}_2)$$

onde a e b definem as partículas: partícula a em $\vec{r}_1$, partícula b em $\vec{r}_2$. Substituindo na eq. de Shrödinger obtemos:

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2\psi_a(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_1) = E_a\,\psi_a(\vec{r}_1) \\[2ex] -\dfrac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2\psi_b(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_2) = E_b\,\psi_b(\vec{r}_2) \end{cases}$$

e $\boxed{E = E_a + E_b}$

⇒ O estado das duas partículas é descrito pela função de onda

$$\begin{cases} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_b(\vec{r}_2)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_a+E_b)t} \\ \qquad\qquad\quad\; = \Psi_a(\vec{r}_1, t)\,\Psi_b(\vec{r}_2, t) \end{cases}$$

onde definimos

$$\begin{cases} \Psi_a(\vec{r}_1, t) \equiv \psi_a(\vec{r}_1)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_a t} \\ \Psi_b(\vec{r}_2, t) \equiv \psi_b(\vec{r}_2)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_b t} \end{cases}$$

⇒ Neste caso podemos dizer que a partícula 1 está no estado a com energia E_a, e a partícula 2 no estado b.

Porém, uma combinação linear desse tipo de soluções também é solução:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \alpha\, \Psi_a(\vec{r}_1, t)\,\Psi_b(\vec{r}_2, t) + \beta\, \Psi_c(\vec{r}_1, t)\,\Psi_d(\vec{r}_2, t)$$

com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, e as energias E_c e E_d ainda satisfazem $E = E_c + E_d$.

Partículas Idênticas: (indistinguíveis)

Na mecânica quântica, partículas tem massa, spin (propriedades intrínsecas). Por exemplo, o elétron tem m_e, $s = 1/2$. Dois elétrons são indistinguíveis dados esses mesmos propriedades intrínsecos. Posição, momento angular, etc. são propriedades externas de uma partícula. Então se temos dois elétrons (não interagentes) com a função de onda dada por

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_b(\vec{r}_2)$$

dizendo que a partícula na posição $\vec{r}_1$ está no estado a, e a partícula na " $\vec{r}_2$ " " " b, estamos (erroneamente no caso de 2 elétrons) assumindo que é possível distinguir uma da outra. Se as partículas são indistinguíveis a função de onda deve refletir isso: não sabemos qual das partículas está em a e qual em b.

Isto quer dizer que, em geral, a função de onda de duas partículas idênticas deve ser uma combinação linear do tipo

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = c_1 \Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) + c_2 \Psi_b(\vec{r}_1)\Psi_a(\vec{r}_2)$$

onde c_1 e c_2 são constantes arbitrárias satisfazendo

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad \text{normalização.}$$

Se considerarmos a e b como todos os números quânticos possíveis formando um conjunto completo de observáveis que comutam (eg, energia, $\vec{J}$ e J_z) vemos que mesmo contando com esse conjunto completo de observáveis <u>não é possível</u> determinar o estado do sistema dado que não conhecemos c_2/c_1.

⇒ Isto é chamado de degenerescência por intercâmbio (ou permutação) e é um problema

Esse problema é resolvido pelo

<u>Postulado de Simetrização</u>

Postulado de Simetrização

Dados 2 partículas idênticas em estados determinados (individualmente) por um conjunto completo de observáveis que comutam (CCOC), existem dois possíveis estados

$$|a\rangle|b\rangle \quad e \quad |b\rangle|a\rangle$$

onde a posição em $|\;\rangle|\;\rangle$ indica partícula 1 e partícula 2.

Definimos o operador Permutação como:

$$P_{12}\left(|a\rangle|b\rangle\right) = |b\rangle|a\rangle \qquad (1 \Leftrightarrow 2)$$

Claramente

$$P_{21} = P_{12} \quad e \quad P_{12}^2 = 1$$

Portanto, os possíveis autovalores do operador permutação são ± 1.

Notemos que $|a\rangle|b\rangle$ <u>não é um autoestado</u> de P_{12} (o mesmo com $|b\rangle|a\rangle$).

Autoestados de P_{12}:

$$|ab\rangle_+ = A\left(|a\rangle|b\rangle + |b\rangle|a\rangle\right)$$

onde A é uma constante de normalização (eg $\frac{1}{\sqrt{2}}$)

Vemos que

$$P_{12}|ab\rangle_+ = A\left(|b\rangle|a\rangle + |a\rangle|b\rangle\right)$$

$\Rightarrow$ $\boxed{|ab\rangle_+ \text{ autoestado de } P_{12} \text{ com autovalor } +1.}$

Analogamente, vemos que

$$|ab\rangle_- = A\left(|a\rangle|b\rangle - |b\rangle|a\rangle\right)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} P_{12}|ab\rangle_- = A\left(|b\rangle|a\rangle - |a\rangle|b\rangle\right) \\ \qquad = -A\left(|a\rangle|b\rangle - |b\rangle|a\rangle\right) = -|ab\rangle_- \end{cases}$$

$\Rightarrow$ $\boxed{|ab\rangle_- \text{ autoestado de } P_{12} \text{ com autovalor } -1}$

$|ab\rangle_+$: simétrico

$|ab\rangle_-$: anti-simétrico

Em particular se voltamos ao hamiltoniano anterior, mas considerando partículas idênticas ($m_1 = m_2$) temos

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Então se o potencial satisfaz

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

é trivial provar que (provar em lista!)

$$[P_{12}, H] = 0$$

o que resulta em

$$\frac{d\langle P_{12}\rangle}{dt} = 0 \qquad \text{(Ehrenfest!)}$$

$\Rightarrow$ se o sistema está num auto estado de P_{12} (simétrico ou anti-simétrico) $\Rightarrow$ permanece nele $\forall$ tempo t.

O postulado de simetrização diz que (10)

um sistema de 2 partículas idênticas deve estar num estado simétrico ou antisimétrico, ou seja deve estar sempre num auto estado de P_{12}.

Em particular, existem 2 tipos de partículas idênticas: bósons e férmions

$$\begin{cases} |ab\rangle_+ : & \text{bósons: Partículas idênticas simétricas sob a operação de permutação} \\ |ab\rangle_- : & \text{férmions: antisimétricas sob permutação} \end{cases}$$

Isto que aqui é simplesmente imposto (postulado) pode ser derivado na teoria relativista (mais precisamente na teoria Quântica de Campos).

Bóson: spin inteiro (0, 1, 2 ...)

Férmions spin semi-inteiro ($\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$, ...)

Impondo (em TQC) que o hamiltoniano tenha um mínimo $\Longrightarrow$ simetria ou anti-simetria

Se agora voltarmos a nosso exemplo anterior, a função de onda do sistema de duas partículas idênticas ($m_1 = m_2$) deve ser

$$\Psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A \left\{ \psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) + \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2) \right\}$$

para dois bósons, ou

$$\Psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A \left\{ \psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) - \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2) \right\}$$

no caso de férmions.

$$\Rightarrow \boxed{\Psi_+(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = +\Psi_+(\vec{r}_2; \vec{r}_1)} \quad \text{bósons}$$

$$\boxed{\Psi_-(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = -\Psi_-(\vec{r}_2; \vec{r}_1)} \quad \text{férmions.}$$

Esse comportamento é chamado de

Teorema de spin e estatística

Mas o que tem a ver a estatística com isso?

Spin e ESTATÍSTICA :

Se focarmos por enquanto caso dos férmions

$$\Psi_-(\vec{r}_1;\vec{r}_2) = A\left(\psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_b(\vec{r}_2) - \psi_b(\vec{r}_1)\,\psi_a(\vec{r}_2)\right)$$

vemos que dois férmions NÃO PODEM estar no mesmo estado. Ou seja se $a=b$

$$\boxed{\Psi_-(\vec{r}_1;\vec{r}_2) = 0} \quad (a=b)$$

$\Rightarrow$ **Princípio de Exclusão de Pauli**

NÃO é possível ter dois férmions no mesmo estado ($a=b \Rightarrow$ mesma energia, mesmo ℓ, mesmo m, etc).

Isto resulta na estatística de Fermi-Dirac

$$n_a = \frac{1}{e^{(\epsilon_a-\mu)/kT}+1} \qquad 0 \leq n_a \leq 1$$

$$\left(\text{PARA } T=0 \quad n_a = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}\right)$$

Por outra parte, essa restrição NÃO se aplica a bósons, dado que para $a=b$

$$\psi_+(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = 2A\left(\psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_a(\vec{r}_2)\right) \neq 0$$

⇒ **Estatística de Bose-Einstein**

$$n_a = \frac{1}{e^{(\varepsilon_a-\mu)/kT}-1}$$ ⇒ Não tem limite

→ Podemos ter um grande número de bósons no mesmo estado e

Ej: Condensado de Bose-Einstein

Em geral se temos N partículas idênticas

$$|1,2,\ldots i,\ldots,j\ldots N\rangle = \pm|1,2,\ldots,j,\ldots,i,\ldots N\rangle$$

com (+) se temos N bósons e
(−) " " N férmions.

———o———

<u>SPIN</u>: Para partículas de spin $\neq 0$ a função de onda de uma partícula é o produto da <u>função de onda espacial</u> vezes o spinor χ

$$\Rightarrow \Psi(\vec{r}, s, m_s) \quad \psi(\vec{r})\,\chi$$

ou na notação de Dirac

$$|\psi(\vec{r}), s, m_s\rangle = |\psi(\vec{r})\rangle\,|s, m_s\rangle$$

Para duas partículas temos

e.g. $(s_1 = s_2 = 1/2)$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, m_1, m_2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\chi(1,2)$$

ou

$$|\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2), m_1, m_2\rangle = |\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\rangle\,|m_1\, m_2\rangle$$

$\downarrow$

da base

$$\{|{+}{+}\rangle, |{+}{-}\rangle, |{-}{+}\rangle, |{-}{-}\rangle\}$$

Sendo duas partículas idênticas de spin 1/2 (15)
(férmion) A função de onda <u>TOTAL</u> deve ser
<u>antisimétrica</u>

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(1,2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)\chi(2,1)$$

$$\Rightarrow \text{ o tripleto de } S=1 \begin{Bmatrix} |++\rangle \\ \dfrac{(|+-\rangle + |-+\rangle)}{\sqrt{2}} \\ |--\rangle \end{Bmatrix}$$

São claramente <u>simétricos</u>, portanto devem estar acompanhados de uma <u>função de onda espacial antisimétrica</u>.

Pelo contrário, o singleto de $S=0$

$$\frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}$$

é <u>antisimétrico</u>, e portanto deve ser acompanhado por uma <u>função de onda espacial simétrica</u>