F 789 – Mecânica Quântica II

1º Semestre de 2023
26/06/2023
Aula 28

Aulas passadas

Postulado da simetrização (N=2): Um sistema de 2 partículas idênticas é descrito apenas por estados simétricos ou anti-simétricos, dependendo das partículas envolvidas. No primeiro caso, as partículas são chamadas de bósons (λ=1) e no segundo caso de férmions (λ = -1).

Os estados simétricos/anti-simétricos são auto-valores de P_{21}

$$P_{21}\psi_S(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2) = \psi_S(\mathbf{r}_2,\varepsilon_2;\mathbf{r}_1,\varepsilon_1) = \psi_S(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2)$$
$$P_{21}\psi_A(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2) = \psi_A(\mathbf{r}_2,\varepsilon_2;\mathbf{r}_1,\varepsilon_1) = -\psi_A(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2)$$

Para obtermos os estados físicos, devemos projetar as funções de onda/spinores nos sub-espaços simétrico ou anti-simétrico usando S ou A:

$$S\psi(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2) = \frac{1}{2}\left[\psi(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2) + \psi(\mathbf{r}_2,\varepsilon_2;\mathbf{r}_1,\varepsilon_1)\right] \equiv \psi_S(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2)$$
$$A\psi(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2) = \frac{1}{2}\left[\psi(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2) - \psi(\mathbf{r}_2,\varepsilon_2;\mathbf{r}_1,\varepsilon_1)\right] \equiv \psi_A(\mathbf{r}_1,\varepsilon_1;\mathbf{r}_2,\varepsilon_2)$$

Sistemas de $N>2$ partículas idênticas

Permutadores: PARA $N=3$, HÁ $3!=6$ PERMUTADORES

$P_{123}=\mathbb{1}$, P_{312}, P_{231}, P_{132}, P_{213}, P_{321}

ATUAÇÃO:

$$P_{312}|1:u_i;2:u_j;3:u_k\rangle = |3:u_i;1:u_j;2:u_k\rangle$$
$$= |1:u_j;2:u_k;3:u_i\rangle$$

$$P_{npq}|1:u_i;2:u_j;3:u_k\rangle = |n:u_i;p:u_j;q:u_k\rangle$$

PARA $N>3$, HÁ $N!$ PERMUTADORES.

Transposições

TRANSPOSIÇÃO É UMA PERMUTAÇÃO QUE TROCA APENAS 2 DAS N PARTÍCULAS:

POR EXEMPLO:

P_{132}, P_{213}, P_{321} SÃO TRANSPOSIÇÕES POIS DEIXAM AS PARTÍCULAS 1, 3 E 2 INTACTAS (RESPECTIVAMENTE) E TROCAM AS OUTRAS DUAS.

TRANSPOSIÇÕES SÃO:

- UNITÁRIAS: $T_1^{-1} = T_2^{\dagger}$
- HERMITIANAS: $T_1^{\dagger} = T_1$
- IGUAIS ÀS SUAS INVERSAS: $T_1^{-1} = T_1$

PROPRIEDADE IMPORTANTE DAS TRANSPOSIÇÕES:

. TODA PERMUTAÇÃO PODE SER ESCRITA COMO UM PRODUTO DE TRANSPOSIÇÕES

$$P_{312} = P_{132} P_{213}$$

$$|1:u_i; 2:u_j; 3:u_k\rangle \xrightarrow{P_{213}} |2:u_i; 1:u_j; 3:u_k\rangle$$

$$= |1:u_j; 2:u_i; 3:u_k\rangle \xrightarrow{P_{132}} |1:u_j; 3:u_i; 2:u_k\rangle$$

$$= |1:u_j; 2:u_k; 3:u_i\rangle$$

. ESSA DECOMPOSIÇÃO NÃO É ÚNICA.

$$P_{312} = P_{321} P_{132} = P_{213} P_{321} = P_{213} P_{321} = P_{213}^2 P_{213} P_{321}$$

. O NÚMERO DE TRANSPOSIÇÕES DA DECOMPOSIÇÃO TEM PARIDADE BEM DEFINIDA. OU É PAR OU É ÍMPAR

Propriedades das permutações

PARA $N > 2$: METADE DAS PERMUTAÇÕES É ÍMPAR E METADE É PAR

- PERMUTAÇÕES SÃO UNITÁRIAS: $P_j^{-1} = P_j^{\dagger}$
- PORÉM NÃO SÃO NECESSARIAMENTE HERMITIANAS
- A PARIDADE DE $P_j^{\dagger}$ É A MESMA DE P_j

Estados completamente (anti-)simétricos

DEFINIÇÃO: UM ESTADO É COMPLETAMENTE SIMÉTRICO SE:

$$P_\alpha |\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \quad \forall \text{ PERMUTAÇÃO } P_\alpha$$

E UM ESTADO É COMPLETAMENTE ANTI-SIMÉTRICO SE:

$$P_\alpha |\psi_A\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_A\rangle \quad \forall \text{ PERMUTAÇÃO } P_\alpha$$

ONDE $\varepsilon_\alpha = (-1)^{p_\alpha}$, ONDE p_α É A PARIDADE DA PERMUTAÇÃO.

DEFINIMOS: $S = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha$; $A = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha$

PROPRIEDADES:

- $\underline{S}$ E $\underline{A}$ SÃO TAIS QUE:

$$\left.\begin{aligned} &\cdot\ S^2 = S \ ; \quad A^2 = A \\ &\cdot\ S^\dagger = S \ ; \quad A^\dagger = A \end{aligned}\right\}$$ SÃO PROJETORES

$AS = SA = 0$ (ORTOGONAIS)

- $P_\alpha S = S P_\alpha = S$
- $P_\alpha A = A P_\alpha = \varepsilon_\alpha A$

DADO $|\psi\rangle$ QUALQUER:

$P_\alpha [S|\psi\rangle] = P_\alpha S|\psi\rangle = [S|\psi\rangle] \Rightarrow$ $S|\psi\rangle$ É TOT. SIMÉTRICO

$$P_\alpha [\underbrace{A|\psi\rangle}_{|\psi_A\rangle}] = P_\alpha A |\psi\rangle = \varepsilon_\alpha [A|\psi\rangle]$$

OU SEJA, S E A SÃO PROJETORES QUE "FILTRAM" UM ESTADO QUALQUER $|\psi\rangle$ GERANDO UM ESTADO TOTALMENTE SIMÉTRICO OU ANTI-SIMÉTRICO, RESPECTIVAMENTE.

NOTE QUE, PARA $N=2$:

$$S = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + P_{21})$$

$$A = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - P_{21})$$

DIFERENTEMENTE DE $N=2$, $S + A \neq \mathbb{1}$ SE $N > 2$

Postulado de simetrização (N qualquer)

Postulado da simetrização (N qualquer): Um sistema de N partículas idênticas é descrito exclusivamente por estados completamente simétricos, no caso de bósons, ou completamente anti-simétricos, no caso de férmions.

BÓSONS: $|\psi_S\rangle$ FÉRMIONS: $|\psi_A\rangle$

(FÓTONS, ^4He) (ELÉTRONS, PRÓTONS, NÊUTRONS)

AS PARTÍCULAS "HERDAM" SUA ESTATÍSTICA DE SEUS CONSTITUINTES:

- UM PRÓTON É FORMADO POR 3 QUARKS OU SEJA, UM NÚMERO ÍMPAR DE FÉRMIONS $\Rightarrow$ O PRÓTON É UM FÉRMION.
- UM MÉSON (POR EXEMPLO, O π) É FORMADO POR UM QUARK E UM ANTI-QUARK $\Rightarrow$ NÚMERO PAR DE

FÉRMIONS ⟹ MÉSON É UM BÓSON

OU SEJA:

UM OBJETO CONSTITUÍDO POR UM NÚMERO
PAR DE FÉRMIONS É UM BÓSON
ÍMPAR DE " É UM FÉRMION

^{4}He: 2 PRÓTONS, 2 NÊUTRONS (NO NÚCLEO)
E 2 ELÉTRONS ⟹ BÓSON

^{3}He: 2 PRÓTONS, 1 NÊUTRON, 2 ELÉTRONS
⟹ FÉRMION

UM OBJETO CONSTITUÍDO POR UM NÚMERO
QUALQUER DE BÓSONS É UM BÓSON.

USANDO AS REGRAS DE SOMA DE MOMENTO ANGULAR, PODEMOS COMPROVAR QUE O TEOREMA DE SPIN-ESTATÍSTICA TAMBÉM É VÁLIDO PARA PARTÍCULAS COMPOSTAS. POR EXEMPLO,

3 FÉRMIONS SÓ PODEM TER MOMENTO ANGULAR TOTAL SEMI-INTEIRO.

Construção de estados (anti-)simetrizados

$N=3$:

COMEÇO COM $|1:a;2:b;3:c\rangle$

ONDE $|a\rangle$, $|b\rangle$ E $|c\rangle$ SÃO ESTADOS ORTOGONAIS

PARA 3 BÓSONS, APLICO O S:

$$S|1:a;2:b;3:c\rangle = \frac{1}{6}\left(\mathbb{1} + P_{312} + P_{231} + P_{132} + P_{213} + P_{321}\right) \times$$

$$\times |1:a;2:b;3:c\rangle = \frac{1}{6}\Big[|1:a;2:b;3:c\rangle +$$

$$|1:c;2:a;3:b\rangle + |1:b;2:c;3:a\rangle + \dots \Big]$$

NORMALIZANDO: $\frac{1}{6} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{6}}$

PARA 3 FÉRMIONS:

$$A|1:a;\, 2:b;\, 3:c\rangle = \frac{1}{6}\left(\mathbb{1} + P_{312} + P_{231} - P_{132} - P_{213} - P_{321}\right) \times$$

$$\times |1:a;\, 2:b;\, 3:c\rangle = \ldots$$

COMO ISSO É BEM TRABALHOSO, HÁ FERRAMENTAS ADEQUADAS PARA ISSO:

PARA FÉRMIONS:

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |1:a\rangle & |1:b\rangle & |1:c\rangle \\ |2:a\rangle & |2:b\rangle & |2:c\rangle \\ |3:a\rangle & |3:b\rangle & |3:c\rangle \end{vmatrix}$$

DETERMINANTE DE SLATER

TROCANDO OS (-1) DO DETERMINANTE, OBTEMOS $|\psi_S\rangle$. A ESTRUTURA MATEMÁTICA ENVOLVIDA É CHAMADA DE PERMANENTE.

Evolução temporal de estados (anti-)simetrizados

PODE-SE PROVAR QUE:

- COMO O HAMILTONIANO DE UM SISTEMA DE <u>N</u> PARTÍCULAS IDÊNTICAS É UM OPERADOR TOTALMENTE SIMÉTRICO (POR EXEMPLO, PARA N=3

$$H = \frac{\vec{P}_1^{\,2}}{2m} + \frac{\vec{P}_2^{\,2}}{2m} + \frac{\vec{P}_3^{\,2}}{2m} + V(\vec{R}_1) + V(\vec{R}_2) + V(\vec{R}_3) + \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_3|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_2 - \vec{R}_3|}\ )$$

- SEGUE QUE, SE O ESTADO INICIAL É TOTALMENTE SIMÉTRICO (ANTI-SIMÉTRICO), ENTÃO, SOB A EVOLUÇÃO TEMPORAL, ELE <u>PERMANECE</u>

TOTALMENTE SIMÉTRICO (ANTI-SIMÉTRICO)
PARA OS INSTANTES POSTERIORES.

ISSO MOSTRA A COMPATIBILIDADE DA DINÂMICA
COM O POSTULADO DE SIMETRIZAÇÃO.

Consequências importantes

Tabela periódica: princícipio de Aufbau da Pauling, decorrência do princípio de exclusão de Pauli.

Estatística de gases/líquidos quânticos:

- Férmions: elétrons em metais, ^{3}He líquido, estrelas de nêutrons, supercondutividade.
- Bósons: condensação de Bose-Einstein, ^{4}He líquido (normal e superfluido), sistemas de átomos frios bosônicos.