Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

simetrizadores e anti-simetrizadores

- **O Postulado de Simetrização.**

  Quando um sistema inclui partículas idênticas, somente certos kets do seu espaço de estados podem descrever seus estados físicos. Os estados físicos são, dependendo da natureza das partículas idênticas, completamente simétricos ou completamente anti-simétricos com respeito à permutação destas partículas.

- Chamaremos
  - Bósons, as partículas idênticas que tem estados simétricos;
  - Férmions, as partículas idênticas que tem estados anti-simétricos.

- O estado $|\psi\rangle$ não é qualquer ket de $\mathcal{E}$ (espaço construído pelo produto tensorial de espaços de uma partícula). Isto é, $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_S$ ou $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_A$, sub-espaços de $\mathcal{E}$.

- Regra empírica:
  - spin semi-inteiro $\rightarrow$ férmions: $e^-, e^+, p^+, n,$ muons;
  - spin inteiro $\rightarrow$ bósons: fótons, mesons.

- Essa regra vale para composição de partículas. Exemplo
  - ${}^3\text{He} \rightarrow$ férmion;
  - ${}^4\text{He} \rightarrow$ bóson.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

simetrizadores e anti-simetrizadores

- **Removendo a degenerescência de troca.**

  Considere $|u\rangle$, um ket do espaço de N partículas idênticas (ignore, por hora, simetrização). Se $|u\rangle$ é um estado físico, $P_\alpha|u\rangle$ também seria. Considere $\mathcal{E}_u$ formado por todos os $\{P_\alpha|u\rangle\}$.

  - A dimensão deste espaço seria algo entre 1 e $N!$ (número de estados ortogonais).
  - Tal dimensão é justamente a degenerescência de troca.
  - O novo postulado diz que, de fato, o estado físico é ou totalmente simétrico (bósons) ou totalmente anti-simétrico (férmions).

- Temos que mostrar que $\mathcal{E}_u$ contém um único ket de $\mathcal{E}_S$ ou um único ket de $\mathcal{E}_A$.

  - Para isso, basta usar as relações $S = SP_\alpha$ e $A = \epsilon_\alpha AP_\alpha$, pois se $|u\rangle$ e $P_\alpha|u\rangle$ são

$$\text{ortogonais} \begin{cases} S|u\rangle = SP_\alpha|u\rangle \Rightarrow \text{o que faz deles colineares.} \\ \\ A|u\rangle = \epsilon_\alpha AP_\alpha|u\rangle \Rightarrow \text{o que faz deles colineares.} \end{cases}$$

- Todos os kets de $\mathcal{E}_u = \{P_\alpha|u\rangle\}$ quando simetrizados ficam colineares, isso indica que a simetrização de qualquer membro deste sub-espaço gera um único ket.
- *A degenerescência de troca foi removida.* Vale também para os anti-simetrizados.
- Como veremos, existirão situações em que a simetrização ou a anti-simetrização de $|u\rangle$ gerarão kets nulos.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

Construindo os kets físicos

■ **Regra de Construção para N Partículas.**

★ Enumere as partículas arbitrariamente e construa um ket $|u\rangle$, correspondente ao estado físico considerado e aos números dados (arbitrados) às partículas;

★ Aplique S ou A em $|u\rangle$, dependendo se as partículas são bósons ou férmions;

★ Normalize o que obtido com a estratégia acima.

■ **Aplicação à sistemas de duas partículas idênticas.**

∘ Suponha que uma possa ser caracterizada por um ket (de uma partícula) $|\varphi\rangle$ e a outra pelo ket (também de uma partícula) $|\chi\rangle$.

∘ Suponha que as partículas ocupem kets distintos, $|\varphi\rangle \neq |\chi\rangle$.

★ Primeira regra: $|u\rangle = |1\colon \varphi; 2\colon \chi\rangle$

★ Segunda regra: $\begin{cases} S|u\rangle = \left(\frac{1}{2!}\sum_\alpha P_\alpha\right)|u\rangle = \frac{1}{2}\left(|1\colon \varphi; 2\colon \chi\rangle + |1\colon \chi; 2\colon \varphi\rangle\right) \\ \\ A|u\rangle = \left(\frac{1}{2!}\sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\alpha\right)|u\rangle = \frac{1}{2}\left(|1\colon \varphi; 2\colon \chi\rangle - |1\colon \chi; 2\colon \varphi\rangle\right) \end{cases}$

★ Para $\begin{cases} |\varphi;\chi\rangle = cS|u\rangle \\ |\varphi;\chi\rangle = cA|u\rangle \end{cases} \Rightarrow \langle\varphi;\chi|\varphi;\chi\rangle = \dfrac{c^2}{4}(1+1) = 1 \rightarrow c = \sqrt{2}.$

$\therefore$ os kets normalizados são $|\varphi;\chi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\colon \varphi; 2\colon \chi\rangle + \epsilon|1\colon \chi; 2\colon \varphi\rangle\right)$

com $\epsilon = 1 \rightarrow$ bósons e $\epsilon = -1 \rightarrow$ férmions.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

Operadores de Permutação - Sistema de N partículas

★ Suponha agora que $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$

Neste caso, a primeira regra fornece $|u\rangle = |1\colon \varphi; 2\colon \varphi\rangle \Rightarrow$ já simetrizado.

A simetrização nos leva à $\begin{cases} S|u\rangle = \frac{1}{2}\big(|1\colon \varphi; 2\colon \varphi\rangle + |1\colon \varphi; 2\colon \varphi\rangle\big) = |u\rangle; \\ \\ A|u\rangle = \frac{1}{2}\big(|1\colon \varphi; 2\colon \varphi\rangle - |1\colon \varphi; 2\colon \varphi\rangle\big) = 0. \end{cases}$

- O que permite concluir: *Não existe ket em $\mathcal{E}_A$ para descrever um estado físico na qual dois férmions estão no mesmo estado individual* $|\varphi\rangle$. Familiar? Esse é o princípio de exclusão de Pauli.

■ Generalização para um número arbitrário de partículas.

- Comece com $N = 3$. Suponha que os três estados normalizados sejam dados por $|\varphi\rangle, |\chi\rangle$ e $|\omega\rangle$.

★ Regra 1: $|u\rangle = |1\colon \varphi; 2\colon \chi; 3\colon \omega\rangle$

★ Regra 2: caso bósons.

$$S|u\rangle = \frac{1}{3!}\sum_\alpha P_\alpha|u\rangle = \frac{1}{6}\Big(|1\colon \varphi; 2\colon \chi; 3\colon \omega\rangle + |1\colon \omega; 2\colon \varphi; 3\colon \chi\rangle + |1\colon \chi; 2\colon \omega; 3\colon \varphi\rangle +$$
$$+ |1\colon \varphi; 2\colon \omega; 3\colon \chi\rangle + |1\colon \chi; 2\colon \varphi; 3\colon \omega\rangle + |1\colon \omega; 2\colon \chi; 3\colon \varphi\rangle\Big)$$

★ Regra 3: Se os estados $|\varphi\rangle, |\chi\rangle$ e $|\omega\rangle$ são ortonormais, $c = \sqrt{3!}$.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

★ **Comentários adicionais: caso bósons**

○ Suponha que duas partículas ocupem o mesmo estado, por exemplo, $|\varphi\rangle = |\chi\rangle$

Neste caso, $|\varphi;\varphi;\omega\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\Big(|1{:}\ \varphi; 2{:}\ \varphi; 3{:}\ \omega\rangle + |1{:}\ \varphi; 2{:}\ \omega; 3{:}\ \varphi\rangle + |1{:}\ \omega; 2{:}\ \varphi; 3{:}\ \varphi\rangle\Big)$

○ Se os três kets são iguais, $|\varphi\rangle = |\chi\rangle = |\omega\rangle$, então $|u\rangle = |1{:}\ \varphi; 2{:}\ \varphi; 3{:}\ \varphi\rangle$

★ Regra 2: caso férmions.

$$A|u\rangle = \frac{1}{3!}\sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\alpha |u\rangle = \frac{1}{6}\sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\alpha |1{:}\ \varphi; 2{:}\ \chi; 3{:}\ \omega\rangle$$

Perceba que os sinais são definidos segundo as mesma regras que um determinante.

Esse é o chamado determinante de Slater:

$$A|u\rangle = \frac{1}{3!}\begin{vmatrix} |1{:}\ \varphi\rangle & |1{:}\ \chi\rangle & |1{:}\ \omega\rangle \\ |2{:}\ \varphi\rangle & |2{:}\ \chi\rangle & |2{:}\ \omega\rangle \\ |3{:}\ \varphi\rangle & |3{:}\ \chi\rangle & |3{:}\ \omega\rangle \end{vmatrix}$$

○ Note que respeita o princípio de exclusão de Pauli: $A|u\rangle$ é zero, sempre que

duas partículas ocupam o mesmo estado, isso é $\begin{cases} |\varphi\rangle = |\chi\rangle, \text{ ou} \\ |\chi\rangle = |\omega\rangle, \text{ ou} \\ |\varphi\rangle = |\omega\rangle \end{cases}$

★ Regra 3: Normalização $c = \sqrt{3!}$. Mais partículas é direto.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

★ **Comentários adicionais: caso férmions**

- Note que poderíamos ter dois estados com a mesma parte espacial, mas com spins diferentes. Isso seria suficiente para garantir que o determinante não fosse nulo.
- A hipótese de uma solução como um único produto direto de kets de uma partícula é uma aproximação forte. É a hipótese inicial (que trata partículas interagentes como se fossem independentes) da chamada aproximação Hartree-Fock). Precisamos definir bases que atuem nos espaços de estados físicos (A ou S).

■ **Construção de uma base no espaço de estados físicos.**

- Considere um sistema de N partículas idênticas.
  - Comece com uma base $\{|u_i\rangle\}$ no espaço de estados de uma partícula e construa $\{|1{:}\, u_i; 2{:}\, u_j; \dots; N{:}\, u_p\rangle\} \equiv \mathcal{E} \rightarrow$ É base. Aprendemos isso em F689.
  - O espaço físico de partículas idênticas não é $\mathcal{E}$ e sim $\mathcal{E}_S$ ou $\mathcal{E}_A$.
- Como determinar uma base do espaço físico?
  - Aplicando S ou A em todos os kets de $\mathcal{E} = \{|1{:}\, u_i; 2{:}\, u_j; \dots; N{:}\, u_p\rangle\}$ podemos obter um conjunto de vetores que definem $\mathcal{E}_S$ ou $\mathcal{E}_A$.
  - Será que eles formam uma base?

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- Seja $|\varphi\rangle$ um ket arbitrário de $\mathcal{E}_S$ (caso $\mathcal{E}_A$ é semelhante).
  - Como $\mathcal{E}$ é uma base, podemos sempre escrever

$$|\varphi\rangle = \sum_{i,j,\ldots,p} a_{i,j,\ldots p}|1\colon u_i; 2\colon u_j; \ldots; N\colon u_p\rangle$$

  - Mas $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}_S$, então $S|\varphi\rangle = |\varphi\rangle$. E isso implica em

$$S|\varphi\rangle = |\varphi\rangle = \sum_{i,j,\ldots,p} a_{i,j,\ldots p} S|1\colon u_i; 2\colon u_j; \ldots; N\colon u_p\rangle$$

  - Note que nem sempre os $S|1\colon u_i; 2\colon u_j; \ldots; N\colon u_p\rangle$ são independentes!
  - De fato, os kets não simetrizados (por exemplo, $|1\colon u_i; 2\colon u_j; \ldots; N\colon u_p\rangle$), que possuem as mesmas funções $(u_i, u_j, \ldots, u_p)$ de uma partícula (mesmas em número e em espécie), quando simetrizados dão o mesmo ket simetrizado (já vimos isso). Isso mostra que $|\varphi\rangle$ é uma combinação de kets simétricos de $\mathcal{E}_S$.
  - O mesmo ocorreria se tivéssemos antissimetrizando.
  - Tal discussão introduz o conceito de **Número de Ocupação**: por definição para o ket $|1\colon u_i; 2\colon u_j; \ldots; N\colon u_p\rangle$, o número de ocupação n_k do estado individual $|u_k\rangle$ é igual ao número de vezes que o estado $|u_k\rangle$ aparece na sequência $|u_i\rangle, |u_j\rangle, \ldots, |u_p\rangle$. Isso é o número de partículas no estado $|u_k\rangle$. Temos, obviamente, $\displaystyle\sum_k n_k = N$.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- Dois kets diferentes, com os mesmos números de ocupação, quando sujeitos ao operador S, dão a mesma coisa. Daqui para frente será denotado por
$$|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle = cS|\underbrace{1\!:u_1; 2\!:u_1; ...; n_1\!:u_1}_{n_1 \text{ em } |u_1\rangle}; \underbrace{n_1\!+\!1\!:u_2, ..., n_1\!+\!n_2\!:u_2}_{n_2 \text{ em } |u_2\rangle}; ...\rangle.$$
Genericamente, nesta notação, temos n_k partículas em $|u_k\rangle$.
- Para o caso de férmions basta trocar S por A.

■ *Algumas propriedades dos estados* $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$.

- O que devemos esperar do produto escalar de dois kets, $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$ e $|n'_1, n'_2, ..., n'_k, ...\rangle$?
- Serão diferentes de zero, somente se os números de ocupação forem iguais, isto é: $n_k = n'_k, \ \forall\ k$. Se $n_1 > n'_1,$ vai sobrar $|u_1\rangle$ que é ortogonal à $\forall\ |u_j\rangle$ para $j \neq i$.

- Se as partículas estudadas são bósons, os kets $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$, com n_k arbitrário, mas restrito à condição $\sum_k n_k = N$, formam uma base.
- Já vimos que $\forall\ |u\rangle$ simétrico, é combinação de $S|1\!:u_i; 2\!:u_j; ...; N\!:u_p\rangle$ e cada um desses kets é por definição um $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

continuação: ainda para bósons.

- Assim, $\forall\ |u\rangle$ simétrico, ele será uma combinação de $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$, o que caracteriza $\{|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle\}$ como sendo uma base.
- Vimos também que $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$ e $|n'_1, n'_2, ..., n'_k, ...\rangle$ são ortogonais, salvo se $n_1 = n'_1, n_2 = n'_2, ..., n_k = n'_k$ (e nesse caso a norma é 1). O caracteriza $\{|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle\}$ como sendo uma base ortonormal.
- Para caracterizar que temos de fato uma base a partir da simetrização de um conjunto completo de kets de $\mathcal{E}$, precisamos apenas mostrar que o ket nulo não pode ser obtido nesse processo. Se conseguirmos o ket nulo, a base seria linearmente dependente.

$$|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle = cS|\underbrace{1\colon u_1; 2\colon u_1; ...; n_1\colon u_1}_{n_1 \text{ em } |u_1\rangle}; \underbrace{n_1+1\colon u_2, ..., n_1+n_2\colon u_2}_{n_2 \text{ em } |u_2\rangle}; ...\rangle =$$

$$= c\frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha |1\colon u_1; 2\colon u_1; ...; n_1\colon u_1; n_1+1\colon u_2, ..., n_1+n_2\colon u_2; ...\rangle \Rightarrow \text{troca}$$

entre iguais gera kets colineares com coeficientes positivos e iguais. Troca entre distintos gera kets ortogonais. Após juntar os iguais (soma direta pois todos tem o mesmo coeficiente) temos uma soma de vetores ortogonais e portanto, nunca igual à zero.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- E se as partículas forem férmions?

  A base do estado físico seria obtida escolhendo o conjunto de kets $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$ nos quais, os números de ocupação são $n_k = 1$ ou $n_k = 0$. Continua valendo $\sum_k n_k = N$.

  - Conforme vimos nos slides 2 e 5, para os caso de duas e três partículas, respectivamente, quando mais de uma partícula ocupam o mesmo estado individual, a antisimetrização anula o ket físico resultante. Ou seja, se um dos números de ocupação for maior ou igual à 2 em $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$, esse ket fica automaticamente igual à zero devido à antissimetrização.
  - Se todos os números de ocupação forem 1 ou 0, então $|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle \neq 0$. Isso porque (escolhi os primeiros N estados individuais como ocupados)

$$\underbrace{|1, 1, ..., 1, 0, 0, 0...\rangle}_{N \text{ partículas em estados distintos}} = c \sum_\alpha \epsilon_\alpha \underbrace{P_\alpha |1\!:u_1; 2\!:u_2; ...; N\!:u_k\rangle}_{\text{kets ortogonais}}$$

- Quanto vale c, em

$$|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle = cS|\underbrace{1\!:u_1; 2\!:u_1; ...; n_1\!:u_1}_{n_1 \text{ em } |u_1\rangle}; \underbrace{n_1{+}1\!:u_2, ..., n_1{+}n_2\!:u_2}_{n_2 \text{ em } |u_2\rangle}; ...\rangle?$$

  Mostre que $c = \sqrt{N!}$ para férmions e $c = \sqrt{N!/n_1!n_2!...}$ para bósons.