Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- **Aplicação dos outros postulados do capítulo III (F689) em um sistema de partículas idênticas.** Vimos que para um sistema de partículas idênticas, na troca entre duas, o ket é simétrico ou anti-simétrico. Não há outra possibilidade. *Será que existe alguma contradição quando aplicamos os outros postulados?*

Olharemos $\begin{cases} \star \text{ como os processos de medidas são descritos com kets} \\ \quad \text{pertencendo à } \mathcal{E}_S \text{ ou à } \mathcal{E}_A; \\ \\ \star \text{ que a evolução temporal não retira } |\psi(t)\rangle \text{ para fora de} \\ \quad \mathcal{E}_S \text{ ou de } \mathcal{E}_A. \end{cases}$

- Em resumo, nosso desejo (vamos verificar) é que todo o formalismo desenvolvido até agora para a Mecânica Quântica possa ser aplicado, sem contradições, dentro de $\mathcal{E}_S$ ou de $\mathcal{E}_A$
- Postulados de medida: Qual seria probabilidade de encontrar o sistema em um dado estado físico, estando ele em t no estado $|\psi(t)\rangle$. Sendo um sistema de partículas idênticas, esperamos que $|\psi(t)\rangle$ seja totalmente simétrico ou totalmente anti-simétrico. Se $|u\rangle$ é o estado do sistema após a medida, esperamos que a probabilidade de encontrar o sistema nesse estado seja $|\langle u|\psi(t)\rangle|^2$. *Isso corresponde à realidade experimental.*

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- Se a medida é
  - completa, por exemplo, posição e spin de todas as partículas $\rightarrow$ $|u\rangle$ é único.
  - incompleta, por exemplo, uma partícula ou apenas spin $\rightarrow$ vários $|u\rangle's$ ortogonais, somam-se as probabilidades.

- **Observáveis físicas: invariança de $\mathcal{E}_S$ e $\mathcal{E}_A$.**

- Alguns exemplos para o sistema de 3 partículas idênticas (o que em comum?)

⋆ Posição do centro de massa

$$\mathbf{R}_G = \frac{1}{3}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_3)$$

⋆ Momento linear total

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_3$$

⋆ Momento angular orbital total

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_3$$

⋆ Energia eletrostática de repulsão

$$W = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1|}\right)$$

⋆ Spin total

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$$

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- Note que todos os exemplos do slide anterior são de operadores simétricos com respeito à troca de partículas. Esperado? Sim, pois elas são partículas idênticas.
- Matematicamente, vamos representar isso da seguinte maneira: se G é uma observável física de um sistema de partículas idênticas, $[G, P_\alpha] = 0 \ \forall \ \alpha$.
  - Note que $\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ não é uma observável, pois não é simétrico sob efeito de P_{21} (troca de sinal). Entretanto, $|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| = \sqrt{(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)^2}$ é observável física.
- A relação $[G, P_\alpha] = 0$ implica que $\mathcal{E}_S$ e $\mathcal{E}_A$ são invariantes sob a ação da observável G.
  - Lembre que se $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{A(S)} \Rightarrow P_\alpha|\psi\rangle = \epsilon_\alpha|\psi\rangle \rightarrow \begin{cases} \text{Essa propriedade que} \\ \text{que garante que } |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{A(S)} \end{cases}$
  - Que tal $G|\psi\rangle$? Para ver se pertence à $\mathcal{E}_{A(S)}$, aplique P_α, lembrando da regra de comutação acima, isto é $P_\alpha G|\psi\rangle = GP_\alpha|\psi\rangle = \epsilon_\alpha G|\psi\rangle$. O que garante que $G|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{A(S)}$.
- Todas as operações efetuadas por uma observável qualquer G – em particular, a determinação dos autovalores e autovetores - podem ser aplicadas dentro de um dos subespaços $\mathcal{E}_A$ ou $\mathcal{E}_S$. Isso vale para qualquer função de G.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- **Comentário:**

  Todos os autovalores de G de $\mathcal{E}$ não são necessariamente encontrados em $\mathcal{E}_S$ ou $\mathcal{E}_A$. O efeito do postulado de simetrização é de retirar alguns autovalores. Note "retirar" e não "mudar". Isso porque $\mathcal{E}_S$ (ou $\mathcal{E}_A$) é globalmente invariante sob ação de G, o que faz qualquer vetor de G em $\mathcal{E}_S$ (ou $\mathcal{E}_A$) um autovetor de G, em $\mathcal{E}$, com o mesmo autovalor.

- **Postulados de evolução temporal:**

  A Hamiltoniana, H, de um sistema de partículas idênticas precisa ser uma observável física, isto é, $[H, P_\alpha] = 0$.

◦ Exemplo: átomo de hélio.

$$H(1,2) = \underbrace{\frac{\mathbf{P}_1^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{P}_2^2}{2m_e}}_{\text{energia cinética}} \underbrace{-\frac{2e^2}{R_1} - \frac{2e^2}{R_2}}_{\text{atração nuclear}} \underbrace{+\frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}}_{\text{repulsão eletrônica}}$$

Note que $H(1,2) = H(2,1)$, ou seja $[H, P_\alpha] = 0$.

◦ A equação Schrödinger $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ pode ser escrita por

$$d|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}dtH|\psi(t)\rangle \Rightarrow |\psi(t+dt)\rangle - |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}dtH|\psi(t)\rangle$$

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- O que permite escrever $|\psi(t+dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} dtH|\psi(t)\rangle = \left(1+\frac{dtH}{i\hbar}\right)|\psi(t)\rangle$

Ao aplicar P_α nesta equação, obtemos:

$$P_\alpha|\psi(t+dt)\rangle = \left(1+\frac{dtH}{i\hbar}\right)P_\alpha|\psi(t)\rangle \Rightarrow \text{ se } |\psi(t)\rangle \begin{cases} \text{é um autovetor de } P_\alpha \\ \text{com autovalor } \epsilon_\alpha, \end{cases}$$

conclui-se que $P_\alpha|\psi(t+dt)\rangle = \left(1+\frac{dtH}{i\hbar}\right)\epsilon_\alpha|\psi(t)\rangle = \epsilon_\alpha \underbrace{\left(1+\frac{dtH}{i\hbar}\right)|\psi(t)\rangle}_{|\psi(t+dt)\rangle}$, ou seja

$P_\alpha|\psi(t+dt)\rangle = \epsilon_\alpha|\psi(t+dt)\rangle \Rightarrow |\psi(t+dt)\rangle$ também é, com o mesmo autovalor.

Conclusão

A evolução temporal não remove o ket $|\psi(t)\rangle$ do espaço $\mathcal{E}_S$ (ou $\mathcal{E}_A$).

- Note que re-derivamos acima, o operador que causa deslocamento temporal em $|\psi(t)\rangle$. Na aula 8, slide 11, obtivemos $U(t+dt,t) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar}$ que quando aplicado em $|\psi(t)\rangle$ leva à $|\psi(t+dt)\rangle$. Basta ver que $[P_\alpha, U] = 0$ para concluir que a caixa azul está correta.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- **Discussão**

Quais as consequências físicas decorrentes do postulado de simetrização?

- Diferenças entre bósons e férmions. Princípio de exclusão de Pauli.

$\underbrace{\text{Simetrização}}$	X	$\underbrace{\text{Anti-simetrização}}$
bósons $\{$ muitas partículas podem ocupar o mesmo estado quântico individual		férmions $\{$ dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico individual.

- O princípio de exclusão de Pauli foi estabelecido para átomos. Agora vimos que é geral e vale para todos os sistemas envolvendo férmions idênticos.

- **Alguns exemplos**

- *Estado fundamental de um sistema de partículas independentes idênticas.*

Primeiro lembre que a Hamiltoniana de um sistema de partículas idênticas, bósons ou férmions, interagentes ou não-interagentes, é sempre simétrica com respeito à permutações destas partículas.

Considere o sistema de N partículas que não interagem. Como seria a Hamiltoniana? Que tal

$$H(1,2,...,N) = \overbrace{h(1) + h(2) + ... + h(N)}^{\text{mesmo } h}$$

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- $h(1)$ é uma função apenas das observáveis associadas com a partícula numerada por 1. Isso vale para qualquer uma delas, $h(j), j = 1, \ldots, N$.
- De fato, as partículas são idênticas: a função h precisa ser a mesma para todas as partículas. Se não fosse, você distinguiria a partícula pela Hamiltoniana dela.

- Para determinar os auto-estados e auto-valores da Hamiltoniana total, $H(1,2,\ldots,N)$ precisamos primeiro calculá-los para as Hamiltonianas individuais $h(j)$, no espaço $\mathcal{E}(j)$ da partícula j.
  - Suponha que conhecemos $h(j)|\varphi_n\rangle = \underbrace{e_n}_{\text{discreto e não degenerado por simplicidade}} |\varphi_n\rangle$

- Como seria o estado de N bósons de H?

$$\text{Bósons} \begin{cases} \xrightarrow{\text{auto-vetores}} |\Phi^{(S)}_{n_1,n_2,\ldots,n_N}\rangle = c\sum_\alpha P_\alpha |1\colon \varphi_{n_1}; 2\colon \varphi_{n_2}; \ldots; N\colon \varphi_{n_N}\rangle \\ \xrightarrow{\text{auto-valores}} E^{(S)}_{n_1,n_2,\ldots,n_N} = e_{n_1} + e_{n_2} + \ldots + e_{n_N} \end{cases}$$

Mostre isso por substituição direta em $\underbrace{H|\Phi^{(S)}_{n_1,n_2,\ldots,n_N}\rangle = E|\Phi^{(S)}_{n_1,n_2,\ldots,n_N}\rangle}_{\text{Use que } h(j)|\varphi_n\rangle = e_n|\varphi_n\rangle}$.

- Se e_1 for o menor dos autovalores de $h(j)$ e $|\varphi_1\rangle$ seu auto-estado correspondente, o estado fundamental e energia de uma sistema de N bósons idênticos ficam $|\Phi^{(S)}_{1,1,\ldots,1}\rangle = |1\colon \varphi_1; 2\colon \varphi_1; \ldots; N\colon \varphi_1\rangle$ com $E = E^{(S)}_{1,1,\ldots,1} = Ne_1$

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- Como seria o estado fundamental de N férmions de H?

  Não é possível colocá-las todas em $|\varphi_1\rangle$. O princípio de exclusão de Pauli precisa ser levado em conta! Suponha $e_1 < e_2 < e_3 < ... < e_{n-1} < e_n < e_{n+1} ...$

$$\text{Férmions} \begin{cases} \xrightarrow{\text{auto-vetor}} \; |\Phi^{(A)}_{1,2,...,N}\rangle = c\sum_\alpha \epsilon_\alpha P_\alpha |1\!:\varphi_1; 2\!:\varphi_2; ...; N\!:\varphi_N\rangle \\ \\ \xrightarrow{\text{auto-valor}} \; E^{(A)}_{1,2,...,N} = e_1 + e_2 + ... + e_N \end{cases}$$

- Vimos que os determinantes de Slater são úteis para descrever estados anti-simétricos.

$$|\Phi^{(A)}_{1,2,...,N}\rangle = \begin{vmatrix} |1\!:\varphi_1\rangle & |1\!:\varphi_2\rangle & \dots & |1\!:\varphi_N\rangle \\ |2\!:\varphi_1\rangle & |2\!:\varphi_2\rangle & \dots & |2\!:\varphi_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ |N\!:\varphi_1\rangle & |N\!:\varphi_2\rangle & \dots & |N\!:\varphi_N\rangle \end{vmatrix}$$

- O maior auto-valor individual é chamado de nível de fermi (e_N).
- Quando e_n é degenerado, o número de vezes que e_n aparece é igual à degenerescência.

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- **Estatística Quântica**

Mecânica Estatística $\Rightarrow$ $\begin{cases} \text{estudar sistemas compostos} \\ \text{de um número muito} \\ \text{grande de partículas.} \end{cases}$

- A estratégia reside em ignorar o estado microscópico de forma exata e se contentar com propriedades macroscópicas (pressão, temperatura, densidade, etc.)
- Um estado macroscópico corresponde à um conjunto de estados microscópicos e é importante (essencial) determinar quantos estados microscópicos possuem certas características (por exemplo, uma dada energia).
- Na mecânica estatística clássica (estatística de Maxwell-Boltzmann), as N partículas são tratadas como se fossem distintas, mesmo quando são idênticas. De fato, dois estados envolvendo N estados individuais são considerados distintos, mesmo quando eles diferem apenas por uma permutação.
- Bósons e férmions mudam esta estatística radicalmente (devido à premissa que sistemas de partículas idênticas têm estados simétricos ou anti-simétricos).

Estatísticas $\begin{cases} \text{Bósons: estatística ou distribuição de Bose-Einstein;} \\ \text{Férmions: estatística de Fermi-Dirac.} \end{cases}$

Sistema de Partículas Idênticas na Mecânica Quântica

- Mesmo entre $\underbrace{\text{Bósons}}_{^4\text{He}}$ e $\underbrace{\text{Férmions}}_{^3\text{He}}$ temos grandes diferenças

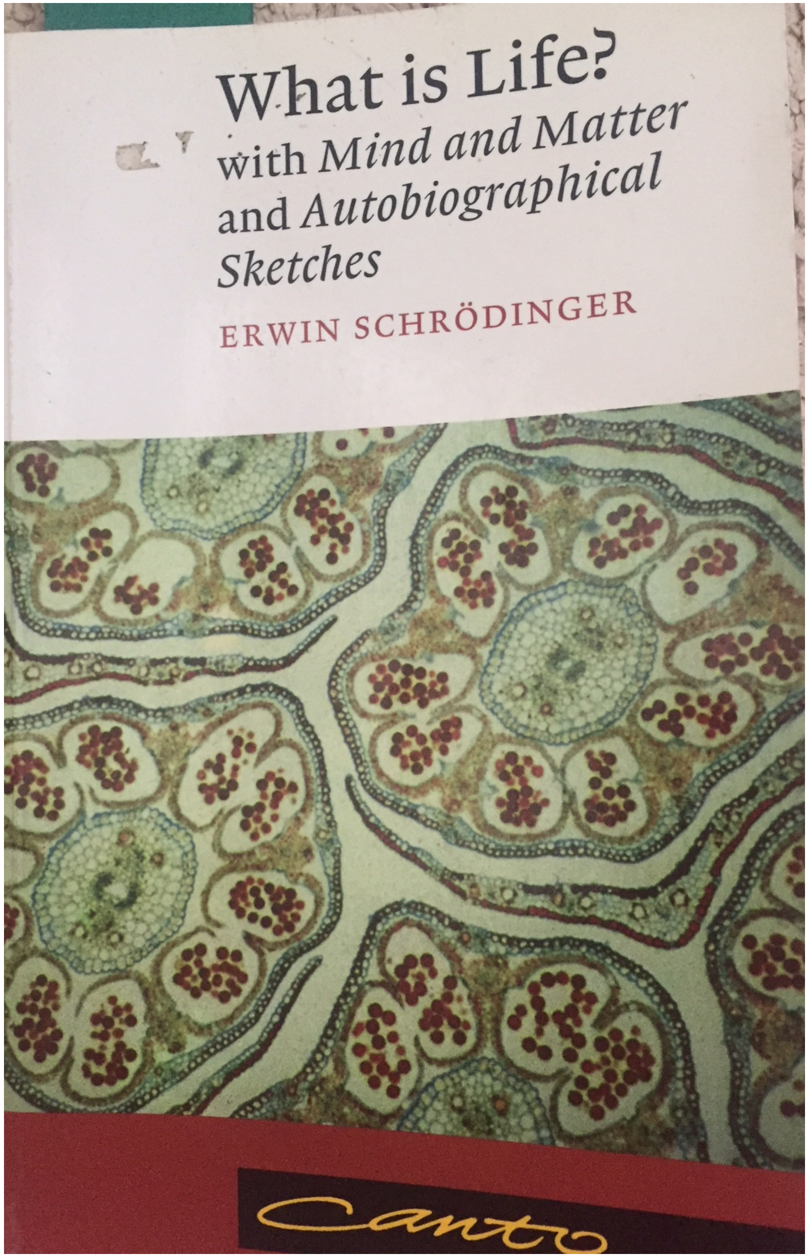
condensação de Bósons leva à superfluidez

não é o caso

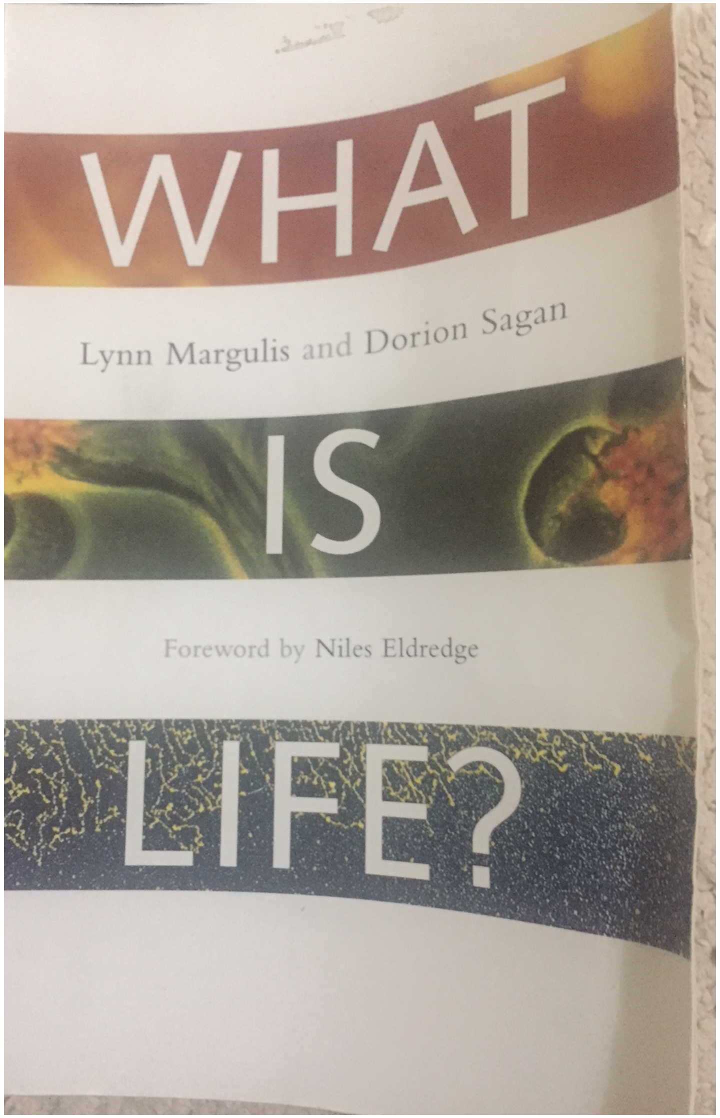
- ○ Essas diferenças podem ser observadas em baixas temperaturas ("empurra" o sistema para o estado fundamental).

- O princípio de exclusão de Pauli tem papel fundamental e afeta de forma essencial a descrição da natureza, envolvendo sistemas de muitos elétrons, em especial, na Física Atômica, Física Molecular, Física da Matéria Condensada, e de forma tão ou mais profunda, na Química Quântica (reações, estruturas eletrônicas, etc.) e na Biologia (química da vida, etc.). Lembre que a química produzida por energia solar só ocorre porque os elétrons mais externos são fáceis de excitar por luz solar - se fossem bósons, estariam todos nos níveis mais profundos e a energia solar não causaria a química necessária para a vida.

Vale a pena conhecer a visão de Schrödinger sobre o papel da Física (e da mecânica quântica) em sistemas mais complexos.



Vale a pena conhecer a visão de pesquisadores de outras áreas da ciência sobre sistemas mais complexos.



Será que deveríamos ter uma disciplina sobre:
"O que é vida? – visão do físico"