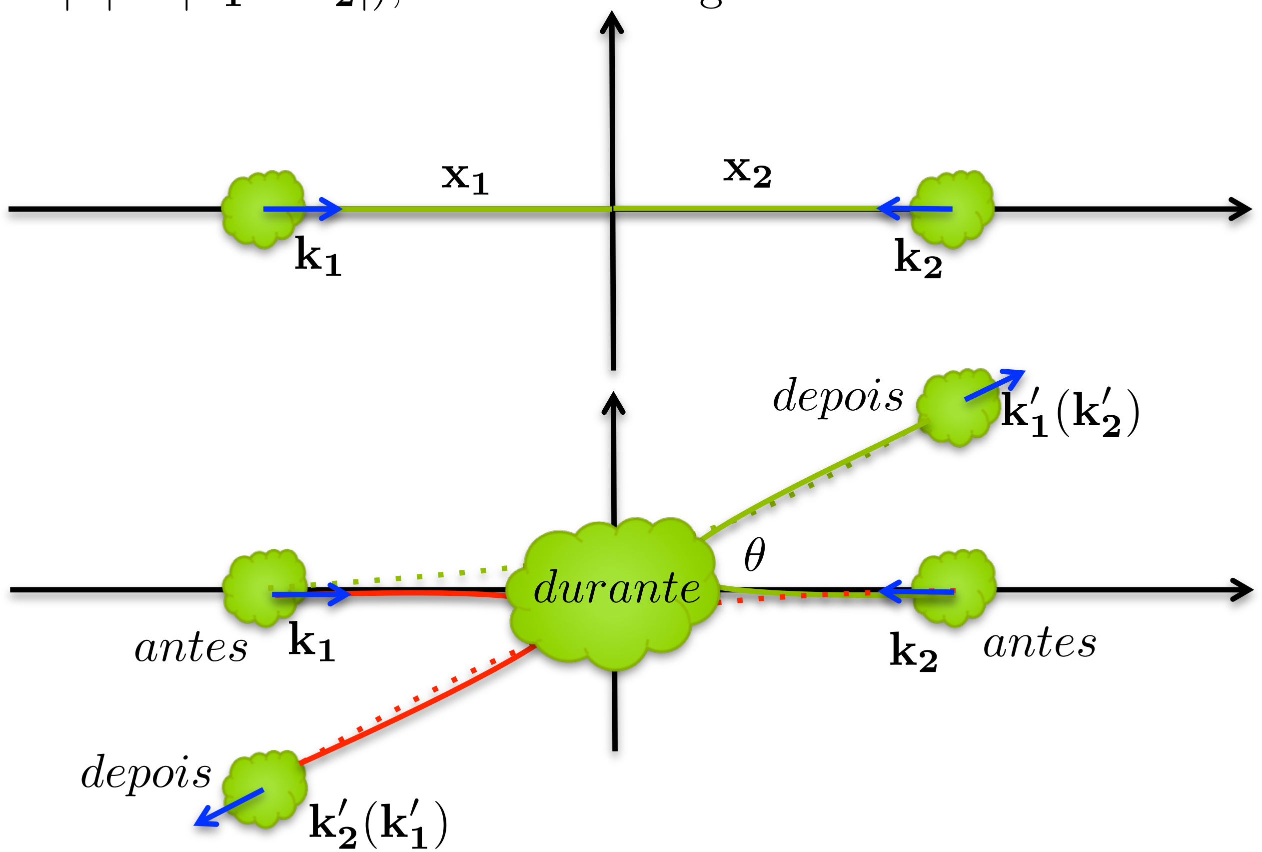
Partículas Idênticas

Considere duas partículas idênticas colidindo (via potencial central $V(r)$, $r = |\mathbf{x}| = |\mathbf{x_1} - \mathbf{x_2}|$), conforme a figura.



Como decidir que as partículas são idênticas? Que tal? Mesma (o) $\begin{cases} \text{massa} \\ \text{carga} \\ \text{spin} \\ \text{etc.} \end{cases}$

Depois de verificar todas estas identidades, certifique-se que a Hamiltoniana do sistema é invariante mediante a troca de partículas.

Partículas Idênticas: Operador de Permutação

Definimos um estado de um sistema de duas partículas, pelo produto $|k'\rangle|k''\rangle$, onde entendemos que o primeiro ket se refere à primeira partícula e o segundo à segunda partícula. Poderíamos ter definido o estado por $|k''\rangle|k'\rangle$, onde agora a partícula 1 é descrita pelo ket $|k''\rangle$ e a partícula 2 pelo ket $|k'\rangle$. Note que

$$\langle k''k'|k'k''\rangle = \langle k''|k'\rangle\langle k'|k''\rangle = 0, \text{ pois } \begin{cases} \langle k''|k'\rangle = 0 \\ \\ \langle k'|k''\rangle = 0 \end{cases} \quad \text{se } k' \neq k''.$$

Como não sabemos qual das duas está em qual estado, é preciso escrever que o sistema se encontra em um estado mais geral $c_1|k'k''\rangle + c_2|k''k'\rangle$. Note que todas as medidas sobre este sistema, para qualquer que sejam c_1 e c_2 levariam à conclusão: *uma partícula tem autovalor k' e a outra k''*, sem saber qual é qual. Esta característica é conhecida por degenerescência de troca.

Complicou: *O conhecimento dos autovalores não determina o ket!*
Veremos que a natureza resolve isso de maneira sábia. Antes de prosseguir, é importante definir um operador de permutação por

$$\boxed{P_{12}|k'k''\rangle = P_{12}|k'\rangle|k''\rangle = |k''\rangle|k'\rangle = |k''k'\rangle} \Rightarrow \boxed{P_{21} = P_{12} \text{ e } P_{12}^2 = 1}$$

Partículas Idênticas: Operador de Permutação

Sob o efeito de P_{12}, partícula 1 tendo k' se torna partícula 1 com k''; partícula 2 tendo k'' se torna partícula 2 com k'. Em outras palavras tem o efeito de trocar 1 e 2. Na prática, sempre temos observáveis que tem etiqueta das partículas. Por exemplo em $\mathbf{S_1}.\mathbf{S_2}$ para um sistema de dois elétrons, $\mathbf{S_1}(\mathbf{S_2})$ é o operador de spin para a partícula 1(2).

Por simplicidade, consideraremos agora o caso específico, onde o ket de duas partículas está completamente especificado pelos autovalores de uma única observável $A(A_1$ atua em 1 e A_2 atua em 2).

Ou seja $\begin{cases} A_1|a'\rangle|a''\rangle = a'|a'\rangle|a''\rangle \\ \\ A_2|a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle \end{cases}$ multiplique a primeira equação por P_{12}

e obtenha: $P_{12}A_1 \underbrace{P_{12}^{-1}P_{12}}_{1} |a'\rangle|a''\rangle = a' P_{12}|a'\rangle|a''\rangle$

$$\underbrace{P_{12}A_1P_{12}^{-1}}_{A_2} |a''\rangle|a'\rangle = a'|a''\rangle|a'\rangle$$

para ser consistente com $A_2|a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle$, ou melhor, com $A_2|a''\rangle|a'\rangle = a'|a''\rangle|a'\rangle$. Concluímos que com nossas definições:

$\boxed{\textit{O operador } P_{12} \textit{ troca as etiquetas dos operadores das partículas!}}$

Partículas Idênticas: Operador de Permutação

Vamos agora considerar a Hamiltoniana de um sistema de duas partículas idênticas

$$H = \frac{\mathbf{p_1}^2}{2m} + \frac{\mathbf{p_2}^2}{2m} + V_{\text{par}}(|\mathbf{x_1} - \mathbf{x_2}|) + V_{\text{ext}}(\mathbf{x_1}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{x_2}).$$

Note que as observáveis como momento e posição precisam aparecer necessariamente de forma simétrica na troca de etiquetas. Isso é o mesmo que pedir que a Hamiltoniana comute com P_{12}. Ou ainda, $P_{12}HP_{12}^{-1} = H$. Ou, de forma equivalente: $P_{12}H = HP_{12} \Rightarrow P_{12}$ *é uma constante de movimento,*

$$\text{isto é} \begin{cases} \text{autokets de } P_{12} \text{ são autokets de } H, \text{ e uma vez que} \\ P_{12}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle \to P_{12}^2|\psi_\lambda\rangle = \lambda P_{12}|\psi_\lambda\rangle \to |\psi_\lambda\rangle = \lambda^2|\psi_\lambda\rangle \to \lambda = \pm 1 \\ \\ \text{e } \therefore \begin{cases} \langle\psi_{-1}|H|\psi_{+1}\rangle = 0 \\ \langle\psi_{+1}|H|\psi_{-1}\rangle = 0 \end{cases} \end{cases}$$

H é bloco diagonal no espaço de autoestados de P_{12}

soluções de $H \to$ *pares ou ímpares na troca*

Uma consequência importante disso é que:

> *Se um estado é simétrico (ou anti-simétrico) mediante permutação em um dado instante, ele permanece com esta propriedade durante sua evolução temporal comandada por H.*

Partículas Idênticas: Operador de Permutação

O autokets de P_{12} são dados por $\begin{cases} \lambda = +1 \Longrightarrow |\psi_{+1}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle\big) \\ \\ \lambda = -1 \Longrightarrow |\psi_{-1}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle\big) \end{cases}$

Alguns autores, inclusive os do nosso livro texto, obtém os autokets de P_{12} por meio dos operadores: S_{12}, simetrizador, e A_{12}, anti-simetrizador, definidos por: $S_{12} \equiv \frac{1}{2}(1 + P_{12})$ e $A_{12} \equiv \frac{1}{2}(1 - P_{12})$. Os nomes destes operadores ficam claros, quando os aplicamos em um ket arbitrário, isto é:

$$\left\{ \begin{matrix} S_{12} \\ A_{12} \end{matrix} \right\} [c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle] = \tfrac{1}{2}(1 \pm P_{12})c_1|k'\rangle|k''\rangle + \tfrac{1}{2}(1 \pm P_{12})c_2|k''\rangle|k'\rangle =$$

$$= \tfrac{1}{2}(c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle) \pm \tfrac{1}{2}(c_1|k''\rangle|k'\rangle + c_2|k'\rangle|k''\rangle) =$$

$$= \frac{c_1 \pm c_2}{2}(|k'\rangle|k''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle).$$

Ou seja, S_{12} simetriza e A_{12} anti-simetriza kets arbitrários. Nas próximas aulas discutiremos esta estratégia para sistemas com mais de duas partículas.

Ignorar a simetria de permutação pode ter sérias consequências. Os autores ilustram isso com um experimento sobre a chamada hipótese de vetor corrente conservado (CVC), uma hipótese que permite uma conexão entre interações fracas e eletromagnetismo. A leitura fica para casa.

Partículas Idênticas: Postulado de Simetrização

A natureza nos apresenta a seguinte realidade: *Os estados que descrevem sistemas contendo N partículas idênticas são simétricos ou anti-simétricos mediante a aplicação de* P_{12} (P_{ij} para ficar mais geral).

$$P_{ij}|N \text{ partículas idênticas}\rangle = +|N \text{ partículas idênticas}\rangle \Rightarrow \text{ Bósons}$$
$$P_{ij}|N \text{ partículas idênticas}\rangle = -|N \text{ partículas idênticas}\rangle \Rightarrow \text{ Férmions}$$

Devido à essas simetrias, os bósons respeitam a estatística de Bose-Einstein e os férmions a estatística de Fermi-Dirac. Estas estatísticas estão diretamente

$$\text{ligadas aos spins das partículas idênticas} \begin{cases} \text{com spin semi-inteiro são férmions.} \\ \\ \text{com spin inteiro são bósons.} \end{cases}$$

Note que na mecânica quântica não-relativistica precisamos postular tudo isso. Na mecânica quântica relativística será possível mostrar que partículas com spin semi-inteiro não podem ser bósons e com spin inteiro não podem ser férmions.

Composições diferentes de partículas podem ser bósons ou férmions. Por exemplo: o núcleo de ^{3}He *é férmion e o núcleo de* ^{4}He *é bóson.*

seu spin é semi-inteiro   seu spin é inteiro

Partículas Idênticas: Férmions e o Princípio de Exclusão de Pauli

Dois férmions (por exemplo, dois elétrons) não podem ocupar o mesmo estado.

Isso é decorrente do fato que $|k'\rangle|k'\rangle$ é um estado simétrico mediante troca de partículas e esse estado não é permitido para férmions (estados anti-simétricos). Suponha um **sistema de duas partículas idênticas:**

$$\text{Se}\begin{cases} \text{férmions} \;\; \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle\right) \;\text{(isso é zero para } k'=k''\text{)} \\ \\ \text{bósons} \;\; \Rightarrow \begin{cases} |k'\rangle|k'\rangle \\ |k''\rangle|k''\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle\right) \end{cases} \qquad \text{(é permitido } k'=k''\text{)} \end{cases}$$

Quando abaixamos a temperatura em um sistema de bósons todas as partículas podem se acomodar no estado de mais baixa energia (condensação de Bose-Einstein). O férmions são menos sociáveis e não é permitido ter dois com os mesmos números quânticos. Por essa razão, por exemplo, um átomo de Lítio, na linguagem de partículas independentes é do tipo $\underbrace{1s^2}_{\uparrow\downarrow} 2s^1$ e não $1s^3$.

Partículas Idênticas: sistema de dois elétrons

Vamos agora considerar um sistema de dois elétrons. O autovalor do operador de permutação é -1. As representações das coordenadas ($\mathbf{x_1}$ e $\mathbf{x_2}$) e de spin (S_{1z} e S_{2z}) podem ser usadas para escrever a solução da seguinte forma:

$$\psi_\alpha = \sum_{m_{s_1}} \sum_{m_{s_2}} C(m_{s_1}, m_{s_2}) \langle \mathbf{x_1}, m_{s_1}; \mathbf{x_2}, m_{s_2} | \alpha \rangle$$

Ψ_α não é um ket. É uma função de onda do Schrödinger

Se a Hamiltoniana comuta com $\mathbf{S}^2$, onde $\mathbf{S} = \mathbf{S_1} + \mathbf{S_2}$ e se ψ_α é escrita por

$$\psi_\alpha = \phi(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2})\chi, \text{ a parte de spin } \begin{cases} \text{singleto} \Rightarrow \chi = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} - \chi_{-+})}_{\text{anti-simétrico}} \\ \text{tripletos} \Rightarrow \chi = \underbrace{\begin{cases} \chi_{++} \\ \chi_{--} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) \end{cases}}_{\text{simétrico}} \end{cases}$$

Nesta notação $\chi_{+-} = \chi(m_{s_1} = +\frac{1}{2}, m_{s_2} = -\frac{1}{2})$. Note que como χ_{++} é simétrico, todos os demais tripletos também são, uma vez que o operador escada $S_- = S_{1-} + S_{2-}$ comuta com P_{12}.

Note que $\langle \mathbf{x_1}, m_{s_1}; \mathbf{x_2}, m_{s_2} | P_{12} | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x_2}, m_{s_2}; \mathbf{x_1}, m_{s_1} | \alpha \rangle$ *e isso implica em*

$$\boxed{\langle \mathbf{x_1}, m_{s_1}; \mathbf{x_2}, m_{s_2} | \alpha \rangle = -\langle \mathbf{x_2}, m_{s_2}; \mathbf{x_1}, m_{s_1} | \alpha \rangle}$$

Partículas Idênticas: sistema de dois elétrons

Podemos escrever $P_{12} = P_{12}^{\text{espaço}} P_{12}^{\text{spin}}$, onde $P_{12}^{\text{espaço}}$ troca as coordenadas espaciais e P_{12}^{spin} troca as coordenadas de spin das partículas. Note que é possível escrever (coincidência ou não): $P_{12}^{\text{spin}} = \frac{1}{2}\left(1 + \dfrac{4}{\hbar^2}\mathbf{S_1}.\mathbf{S_2}\right)$, pois:

$$\mathbf{S_1}.\mathbf{S_2} \begin{cases} +\frac{\hbar^2}{4} \ (\text{tripletos}) \\ \\ -\frac{3\hbar^2}{4} \ (\text{singleto}) \end{cases}$$

lousa

$$\text{Assim, } |\alpha\rangle \rightarrow P_{12}|\alpha\rangle \begin{cases} \phi(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}) \rightarrow \phi(\mathbf{x_2}, \mathbf{x_1}) \\ \\ \chi(m_{s_1}, m_{s_2}) \rightarrow \chi(m_{s_2}, m_{s_1}) \end{cases}$$

O que permite concluir:

Na troca de partículas, se a parte espacial é simétrica a parte de spin é anti-simétrica e se a parte espacial é anti-simétrica, a parte de spin é simétrica. Como consequência: os tripletos têm a parte espacial anti-simétrica e os singletos têm a parte espacial simétrica na troca de partículas.

Partículas Idênticas: sistema de dois elétrons

A função de onda espacial fornece a interpretação probabilística usual, isto é: $|\phi(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}|^2 d^3x_1 d^3x_2$ é a probabilidade de encontrar o elétron 1 no elemento de volume d^3x_1 ao redor de $\mathbf{x_1}$ e o elétron 2 no volume d^3x_2 ao redor de $\mathbf{x_2}$. Talvez a maneira correta de dizer isso seria: *a probabilidade de encontrar um elétron no elemento de volume* d^3x_1 *ao redor de* $\mathbf{x_1}$ *e outro elétron no volume* d^3x_2 *ao redor de* $\mathbf{x_2}$. Para explorar isso de forma mais clara, considere um problema onde as interações entre os dois elétrons (tipo $V(|\mathbf{x_1} - \mathbf{x_2}|)$ e $\mathbf{S_1}.\mathbf{S_2}$) podem ser desprezadas. Nestas circunstâncias a equação de Schrödinger do sistema, na representação das coordenadas fica:

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}_2^2 + V_{ext}(\mathbf{x_1}) + V_{ext}(\mathbf{x_2})\Big]\psi_\alpha = E\psi_\alpha$$

Como a parte espacial da Hamiltoniana é separável, podemos escrever $\phi(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2})$ como um produto de funções em $\mathbf{x_1}$ e em $\mathbf{x_2}$. Devido a exigência de anti-simetria global na troca de partículas, temos que:

$$\phi(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\omega_A(\mathbf{x_1})\omega_B(\mathbf{x_2}) \overset{\substack{\text{simétrico}\\ \uparrow}}{\underset{\substack{\downarrow \\ \text{anti-simétrico}}}{\pm}} \omega_A(\mathbf{x_2})\omega_B(\mathbf{x_1})\big) \begin{cases} \text{o sinal “ + ” para singletos} \\ \textit{anti-simétrico no spin} \\ \text{o sinal “ − ” para tripletos} \\ \textit{simétrico no spin} \end{cases}$$

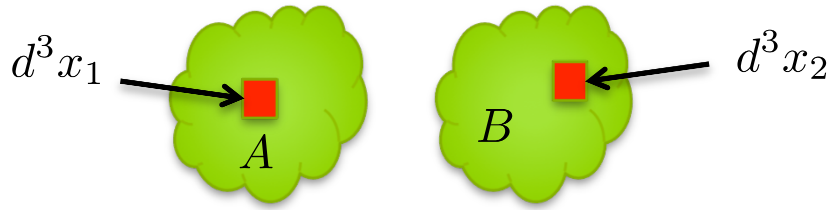
Partículas Idênticas: sistema de dois elétrons

A probabilidade de encontrar um elétron no elemento de volume d^3x_1 ao redor de $\mathbf{x_1}$ e outro elétron no volume d^3x_2 ao redor de $\mathbf{x_2}$ é dada por:

$$\frac{|\omega_A(\mathbf{x_1})|^2|\omega_B(\mathbf{x_2})|^2 + |\omega_A(\mathbf{x_2})|^2|\omega_B(\mathbf{x_1})|^2 \pm 2\mathrm{Re}\big[\omega_A(\mathbf{x_1})\omega_B(\mathbf{x_2})\omega_A^*(\mathbf{x_2})\omega_B^*(\mathbf{x_1})\big]}{2}$$

O termo $\mathrm{Re}\big[\omega_A(\mathbf{x_1})\omega_B(\mathbf{x_2})\omega_A^*(\mathbf{x_2})\omega_B^*(\mathbf{x_1})\big]$ é conhecido por densidade de troca.

Note que quando o par está no estado tripleto, a probabilidade de encontrar duas partículas ocupando a mesma posição vai à zero. Por outro lado, se estão no estado singleto, esta probabilidade ganha um reforço da densidade de troca. Em outras palavras, o elétrons se evitam quando estão no estado tripleto e se "atraem" quando estão no estado singleto. Note também que no mundo real a repulsão Coulombica terá um papel dominante.



Note também que se ω_A e ω_B são grandes em regiões diferentes, a densidade de troca perde importância.

slide 9

lousa

Verificando a proposta de definição, $P_{12}^{\text{spin}} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{4}{\hbar^2}\mathbf{S_1}.\mathbf{S_2}\right)$.

Como fica $P_{12}^{\text{spin}}|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle$?(onde $m_{s_1} = \pm 1; m_{s_2} = \pm 1$)

$$\frac{1}{2}\left(1+\frac{4}{\hbar^2}\mathbf{S_1}.\mathbf{S_2}\right)|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle = \frac{1}{2}\left(1+\frac{4}{\hbar^2}\left(S_{1z}S_{2z}+\frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-}+S_{1-}S_{2+})\right)\right)|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle =$$

$$= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{4}{\hbar^2}\frac{\hbar}{2}m_{s_1}\frac{\hbar}{2}m_{s_2}\right)|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle + \frac{1}{\hbar^2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle =$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2}(1 + m_{s_1}m_{s_2})|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle}_{\text{“termo 1”}} + \underbrace{\frac{1}{\hbar^2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle}_{\text{“termo 2”}}$$

$$\text{Se}\begin{cases} m_{s_1} = m_{s_2} \Rightarrow m_{s_1}m_{s_2} = +1 \rightarrow \text{“termo 1”} = |m_{s_1}, m_{s_2}\rangle; \ \text{“termo 2”} = 0 \\ m_{s_1} \neq m_{s_2} \Rightarrow m_{s_1}m_{s_2} = -1 \rightarrow \text{“termo 1”} = 0; \ \text{“termo 2”} = |m_{s_2}, m_{s_1}\rangle \end{cases}$$

que são as propriedades esperadas de P_{12}^{spin}, ou seja $P_{12}^{\text{spin}}|m_{s_1}, m_{s_2}\rangle = |m_{s_2}, m_{s_1}\rangle$