Mecánica Cuántica II

Guía 3: Partículas idénticas

12 de septiembre 2024

Problema 1: Si el espacio de estados $\mathcal{H}$ de una partícula es de dimensión D finita, la dimensión del espacio de estados de N partículas $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}^{\otimes N}$ será D^N. Se definen el subespacio totalmente simétrico $\mathcal{H}_N^{(s)}$ como el compuesto por autoestados con autovalor $+1$ para cualquier operador de permutación de un par de partículas, y el totalmente antisimétrico $\mathcal{H}_N^{(a)}$, compuesto por los autoestados con autovalor -1 para toda permutación de un par de partículas. Asimismo se definen los operadores de simetrización $\hat{S}$ y antisimetrización $\hat{A}$ como:

$$\hat{S} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p \hat{\Pi}_p \qquad \hat{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p s_p \hat{\Pi}_p$$

donde el índice p indica una permutación arbitraria, s_p es su signo, y $\hat{\Pi}_p$ el operador correspondiente. Los proyectores sobre $\mathcal{H}_N^{(s)}$ y $\mathcal{H}_N^{(a)}$ son a su vez $\hat{P}_s = (1/\sqrt{N!})\, \hat{S}$ y $\hat{P}_a = (1/\sqrt{N!})\, \hat{A}$.

a) Muestre que las dimensiones de $\mathcal{H}_N^{(s)}$ y de $\mathcal{H}_N^{(a)}$ son, respectivamente,

$$\dim\left(\mathcal{H}_N^{(s)}\right) = \binom{D+N-1}{N}, \qquad \dim\left(\mathcal{H}_N^{(a)}\right) = \begin{cases} 0\,, & D < N, \\ \binom{D}{N}\,, & D \geq N\,. \end{cases}$$

b) Muestre que $\dim\left(\mathcal{H}_N^{(s)}\right) + \dim\left(\mathcal{H}_N^{(a)}\right) < \dim(\mathcal{H}_N)$ si $N \geqslant 3$.

c) Particularice al caso $N = 3$ (y $D \geqslant 3$): sean $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ y $|\gamma\rangle$ estados mutuamente ortogonales de una partícula; muestre que el estado $|\psi\rangle = \frac{1}{2}\big(|\alpha\gamma\beta\rangle - |\beta\gamma\alpha\rangle + |\gamma\alpha\beta\rangle - |\gamma\beta\alpha\rangle\big)$ tiene componentes totalmente simétrica y totalmente antisimétrica ambas nulas, y encuentre otro estado con esa característica.
Ayuda: Considere la acción de los permutadores de partículas.

Problema 2: Suponga que el hamiltoniano $\hat{H}_o$ de una partícula actúa solamente sobre variables orbitales, y admite solo tres niveles no degenerados de energías 0, $\hbar\omega_o$ y $2\hbar\omega_o$ con autoestados $|\psi_0\rangle$, $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$, respectivamente. Considere un sistema de dos de tales partículas no interactuantes, es decir $\hat{H} = \hat{H}_o(1) + \hat{H}_o(2)$. Calcule los niveles de energía, sus degeneraciones y sus correspondientes autoestados (utilice los operadores de simetrización y antisimetrización) para el caso de:

a) partículas distinguibles sin espín;

b) fermiones de espín 1/2;

c) bosones de espín 0.

Observe que los estados finales pueden escribirse como producto de una componente de espín por otra componente espacial, para el caso de 2 partículas.

Problema 3: Considere tres partículas idénticas con dos distintos tipos de grados de libertad, de modo que el espacio de Hilbert de cada una sea $\mathcal{H} = \mathcal{K} \otimes \mathcal{L}$ (por ejemplo, el espacio $\mathcal{K}$ podría estar asociado a grados de libertad espaciales y el espacio $\mathcal{L}$ a grados de libertad de espín). Tome el caso donde $\mathcal{K} \cong \mathbb{C}^3$, y $\mathcal{L} \cong \mathbb{C}^2$.

a) Considere los subespacios $\mathcal{H}_3^{(s)}$, $\mathcal{H}_3^{(a)}$ y $\mathcal{H}_3^{(r)}$ de $\mathcal{H}_3 = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ en relación con $\mathcal{K}_3^{(s)}$, $\mathcal{K}_3^{(a)}$, $\mathcal{K}_3^{(r)}$, $\mathcal{L}_3^{(s)}$, $\mathcal{L}_3^{(a)}$ y $\mathcal{L}_3^{(r)}$, y complete la siguiente tabla con las dimensiones de cada uno:

esp	$\mathcal{K}$	$\mathcal{L}$	$\mathcal{H}$	$\mathcal{K}_3$	$\mathcal{K}_3^{(s)}$	$\mathcal{K}_3^{(a)}$	$\mathcal{K}_3^{(r)}$	$\mathcal{L}_3$	$\mathcal{L}_3^{(s)}$	$\mathcal{L}_3^{(a)}$	$\mathcal{L}_3^{(r)}$	$\mathcal{H}_3$	$\mathcal{H}_3^{(s)}$	$\mathcal{H}_3^{(a)}$	$\mathcal{H}_3^{(r)}$
dim	3	2	6												

¿Es $\mathcal{H}_3^{(s)} = \mathcal{K}_3^{(s)} \otimes \mathcal{L}_3^{(s)}$? Muestre que los tres subespacios $\mathcal{K}_3^{(s)} \otimes \mathcal{L}_3^{(r)}$, $\mathcal{K}_3^{(a)} \otimes \mathcal{L}_3^{(r)}$, y $\mathcal{K}_3^{(r)} \otimes \mathcal{L}_3^{(s)}$ están contenidos en $\mathcal{H}_3^{(r)}$ y, por lo tanto, no contienen estados físicamente relevantes. ¿Dónde están los estados totalmente simétricos o totalmente antisimétricos que faltan?

b) Considere ahora el caso en que las partículas son fermiones de espín 1/2, de modo que $\mathcal{L} = \mathbb{C}^2$ y el espacio de estados es $\mathcal{H}_3^{(a)}$. Sea $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle\}$ una base ortonormal de $\mathcal{K}$ y $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ una base ortonormal de $\mathcal{L}$.

b$_1$) Verifique que en $\mathcal{K}_3^{(a)}$ hay un único estado totalmente antisimétrico

$$|\phi\rangle = \hat{A}\,|\alpha\beta\gamma\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big(|\alpha\beta\gamma\rangle + |\gamma\alpha\beta\rangle + |\beta\gamma\alpha\rangle - |\beta\alpha\gamma\rangle - |\gamma\beta\alpha\rangle - |\alpha\gamma\beta\rangle\Big),$$

b$_2$) Verifique también que $\mathcal{K}_3^{(a)} \otimes \mathcal{L}_3^{(s)}$ tiene dimensión 4 y está formado por combinaciones lineales de $|\phi\rangle \otimes |+++\rangle$, $|\phi\rangle \otimes |---\rangle$, $|\phi\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{3}}\big[|+-+\rangle + |-++\rangle + |++-\rangle\big]$ y $|\phi\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{3}}\big[|-+-\rangle + |+--\rangle + |--+\rangle\big]$, donde $|\phi\rangle$ es el estado del ítem anterior.

b$_3$) Una base ortonormal de $\mathcal{H}_3^{(a)}$, que incluya los cinco estados anteriores, es bastante compleja de conseguir (¿cuántos estados faltan?). Es más simple, y recomendable, construir una base ortonormal de $\mathcal{H}_3^{(a)}$ usando el operador de antisimetrización y la base de estados de una partícula: hágalo y compare.

Problema 4: Repita los tres puntos del problema 2 para el caso de un sistema de tres partículas no interactuantes descripto por el hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}_o(1) + \hat{H}_o(2) + \hat{H}_o(3)$.

Problema 5: Considere dos partículas idénticas en el estado $\psi(\xi_1, \xi_2)$ donde ξ_j denota todas las variables asociadas con cada una de las dos partículas.

a) Teniendo en cuenta que el operador correspondiente a la densidad de probabilidad en el elemento infinitesimal $\mathrm{d}\xi$ centrado en ξ_0 para una partícula puede escribirse como $\delta(\xi - \xi_0)$, verifique que la densidad de partículas $\rho(\xi)$ es

$$\rho(\xi) = 2 \int \mathrm{d}\eta \, |\psi(\xi, \eta)|^2$$

tanto en el caso de bosones como fermiones, donde $\rho(\xi)\, d\xi$ es el número de partículas en el elemento infinitesimal $d\xi$ centrado en ξ.

b) Si ahora

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = C\big[\psi_1(\xi_1)\, \psi_2(\xi_2) \pm \psi_1(\xi_2)\, \psi_2(\xi_1)\big]$$

donde ψ_1 y ψ_2 son estados normalizados de una sola partícula, C es la constante de normalización apropiada y el signo tiene en cuenta si las partículas son bosones o fermiones, verifique que entonces

$$\rho(\xi) = |C|^2 \left[|\psi_1(\xi)|^2 + |\psi_2(\xi)|^2 \pm 2 \ \mathrm{Re} \ \psi_1^*(\xi)\psi_2(\xi) \int \mathrm{d}\eta \, \psi_1(\eta)\psi_2^*(\eta) \right]$$

El último término tiene en cuenta los llamados efectos de solapamiento o intercambio. Estudie en qué casos este término será despreciable, y qué relación hay entonces con el hecho de que las partículas sean indistinguibles.

Problema 6: Considere el potencial del oscilador armónico unidimensional

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \ .$$

a) Se colocan en este potencial dos fermiones no interactuantes de espín 1/2 y masa m. Escriba explícitamente el estado fundamental y el primer estado excitado de este sistema de dos partículas, teniendo en cuenta su estadística de espín (son fermiones), y dé sus energías y degeneraciones. Recuerde que para el caso de dos partículas, la función de onda es un producto de una función de espín (espinor) por una espacial.

b) Considere ahora que las dos partículas interactúan mediante la interacción armónica

$$W(x_1, x_2) = \lambda(x_1 - x_2)^2 \ .$$

Escriba el hamiltoniano para las dos partículas en el potencial $V(x)$ considerando la interacción atractiva $\lambda > 0$. Encuentre las energías y autofunciones del estado fundamental y primer y segundo estado excitado utilizando el cambio de variables $X = (x_1 + x_2)/\sqrt{2}$, $x = (x_1 - x_2)/\sqrt{2}$ y teniendo en cuenta los casos $m\omega^2 \ll \lambda$ y $m\omega^2 \gg \lambda$.

Problema 7: Considere 3 electrones no interactuantes sujetos a moverse en una circunferencia de radio R. Calcule los tres niveles de energía más bajos y su multiplicidad, y explicite una base ortonormal para los respectivos autoespacios.

Problema 8: Muestre cuáles son todos los términos espectroscópicos $^{2S+1}L_J$ del silicio: [Ne] $3s^2\, 3p^2$. Utilice las reglas de Hund para determinar el de menor energía.

Problema 9: Encuentre la notación espectroscópica para los estados fundamentales de: escandio (Sc, $Z = 21$, configuración [Ar] $3d^1\, 4s^2$), níquel (Ni, $Z{=}28$, [Ar] $3d^8\, 4s^2$), bromo (Br, $Z{=}35$, [Ar] $3d^{10}\, 4s^2\, 4p^5$) y plata (Ag, $Z{=}47$, [Kr] $4d^{10}\, 5s^1$).

Problema 10: Considere un sistema de dos bosones idénticos de espín 1, ambos sometidos a un potencial central. Indique cuáles son los valores posibles para el espín total, el momento angular orbital total y el momento angular total si las partículas están en las configuraciones $1s^2$ y $1s^1\, 2p^1$.

***Problema 11:** *Ecuaciones de Hartree-Fock.* Considere dos partículas idénticas de espín 1/2 interactuando armónicamente de acuerdo al siguiente hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{h}(1) + \hat{h}(2) + V \ , \qquad \hat{h}(i) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \frac{k}{2}\boldsymbol{r}_i^2 \ , \qquad V = \lambda(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)^2 \ , \quad \lambda \geqslant 0 \ .$$

Se desea comparar la solución exacta con la aproximación de Hartree-Fock, para lo cual se pueden seguir los siguientes pasos:

a) Usando la transformación de variables a la posición $\boldsymbol{R}$ del centro de masa y a la posición relativa $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$, encuentre el espectro y autofunciones de $\hat{H}$ teniendo en cuenta la correcta simetrización.

b) Escriba las ecuaciones de Hartee-Fock para el hamiltoniano $\hat{H}$.

c) Particularice las ecuaciones obtenidas para el caso

$$\phi_1(\boldsymbol{r}, s) = \varphi(\boldsymbol{r})\chi^+(s) \ , \quad \phi_2(\boldsymbol{r}, s) = \varphi(\boldsymbol{r})\chi^-(s) \ ,$$

donde $\chi^\pm(s)$ es la autofunción de $\hat{S}_z$ al autovalor $\pm\hbar/2$ (en este caso el determinante de Slater construido a partir de ϕ_1 y ϕ_2 es un singlete).

d) Trate de resolver las ecuaciones de Hartree-Fock en el caso particular por un método iterativo. Es decir, determine la parte espacial φ de los orbitales por un procedimiento iterativo. Para ello, use como primera aproximación a φ el estado fundamental $\varphi^{(o)}$ del hamiltoniano $\hat{h}$ de una sola partícula; calcule los potenciales de las ecuaciones de Hartree-Fock y obtenga una segunda aproximación $\varphi^{(1)}$ para φ; repita el procedimiento varias veces y verá que converge después de tres iteraciones.

e) Compare el resultado del inciso anterior con el resultado exacto para el estado fundamental. ¿Puede indicar por qué la solución de las ecuaciones de Hartree-Fock obtenida en d) es una aproximación adecuada para el estado fundamental y no para algún estado excitado?

f) Compare el resultado del inciso anterior con el resultado exacto para el estado fundamental. ¿Puede indicar por qué la solución de las ecuaciones de Hartree-Fock obtenida en d) es una aproximación adecuada para el estado fundamental y no para algún estado excitado?

g) ¿Cómo procedería para obtener una aproximación de un estado excitado mediante el método de Hartree-Fock?

---

* Opcional.