

# Partículas indistinguibles

Considerando dos partículas idénticas

- Con todos los kets de la forma  
 $\rightarrow c_1|\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2 + c_2|\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2$   
se obtienen los mismos resultados
- Degeneración de intercambio

- Operador de intercambio  $P_{12}$

- $[H, P_{12}] = 0 \Rightarrow P_{12}$  es constante de mov.
- Los e-valores de  $P_{12}$  son  $+1$  (simétrico),  $-1$  (antisimétrico)

Postulado de simetrización.

- Los sistemas conformados por  $N$  partículas idénticas ocupan estados que son totalmente simétricos o anti-sim.

simetría	estadística	momento angular
- Simétricos	$\leftrightarrow$ Bose-Einstein	$\leftrightarrow$ entero
- Antisimétricos	$\leftrightarrow$ Fermi-Dirac	$\leftrightarrow$ semi entero

Principio de Exclusión de Pauli: dos fermiones idénticos no pueden ocupar el mismo estado.

- Como son fermiones, el estado es antisimétrico respecto al intercambio

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2)$$

Si  $\alpha = \beta$  entonces  $|\psi\rangle = 0$ .

Principio de Exclusión de Pauli  $\Rightarrow$  Tabla periódica

- Para entender mejor la diferencia entre bosones y fermiones pensemos que cada partícula sólo tiene 2 estados posibles  $|\alpha\rangle$  y  $|\beta\rangle$

- Para 2 partículas distinguibles los estados posibles son: (4)

$$\frac{1}{4}|\alpha\rangle_1|\alpha\rangle_2; \frac{1}{4}|\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2; \frac{1}{4}|\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2; \frac{1}{4}|\beta\rangle_1|\beta\rangle_2$$

y combinaciones lineales de estos.

- Para 2 fermiones los estados posibles son: (1)

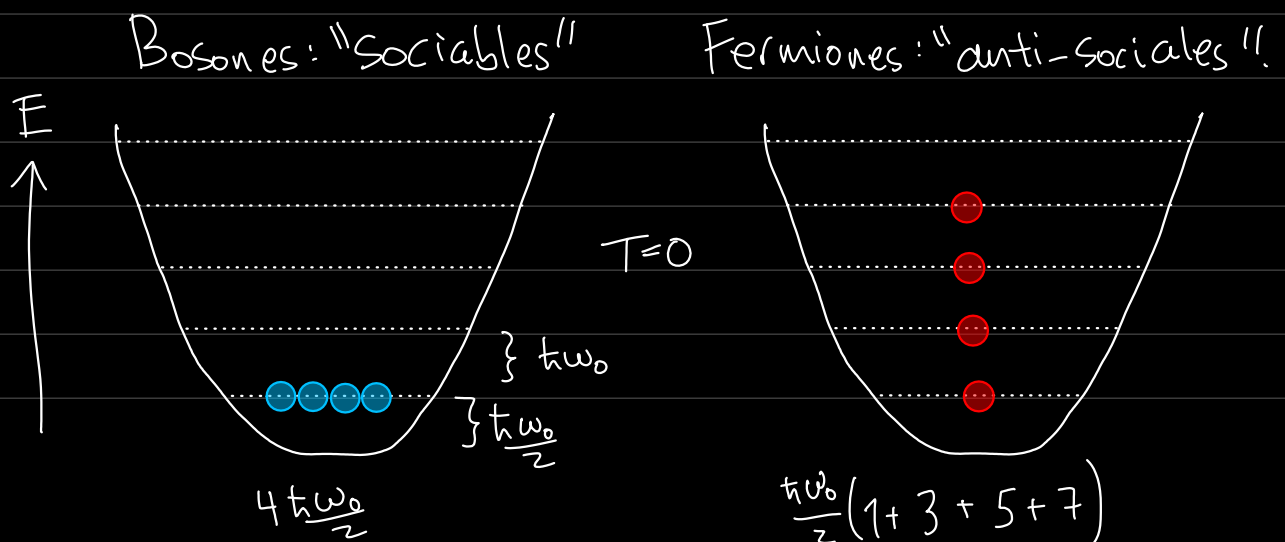
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2)$$

- Para 2 bosones los estados posibles son: (3)

$$\frac{1}{3}|\alpha\rangle_1|\alpha\rangle_2; \frac{1}{3}|\beta\rangle_1|\beta\rangle_2; \frac{1}{3}(|\alpha\rangle_1|\beta\rangle_2 + |\beta\rangle_1|\alpha\rangle_2)$$

que si fueran distinguibles.

Para bosones hay mayor peso estadístico para que ambas partículas estén en el mismo estado.



# Métodos aproximados en M.C.

- Hidrógeno y oscilador armónico tienen solución analítica.

- Esto ocurre para muy pocos sistemas.

→ Para He no hay solución analítica  $\oplus$

→ Para H con correcciones relativistas tampoco.\*

Veremos

- Teoría de perturbaciones (hoy)

- Método variacional

- Método WKB o semi-clásico

## Teoría de perturbaciones

- Se aplica cuando

$$H = H_0 + W$$

conocemos sus e-valores y e-vectores

perturbación "pequeña"

- Burdo → Fino

## Teoría de perturbaciones estacionaria

$H_0, W$  no dependen de  $t$ .

Objetivo: Cómo afecta la presencia de  $W$  a los e-valores y e-vectores de  $H$ .

$W$  es pequeño si sus elementos de matriz son más chicos que los de  $H$ . En realidad veremos que la condición importante es que los elementos de matriz de  $W$  sean más chicos que las diferencias entre los e-valores de  $H$ .

$$(\hat{W} \sim H_0)$$

$W = \lambda \hat{W}$  con  $\lambda$  un número adimensional  $\lambda \ll 1$   
 Con  $\lambda$  controlamos el tamaño de la perturbación

La teoría de perturbaciones estacionaria (TPE) consiste en escribir los e-valores y e-vectores de  $H$  como serie de potencias de  $\lambda$  y quedarnos con los términos de interés.

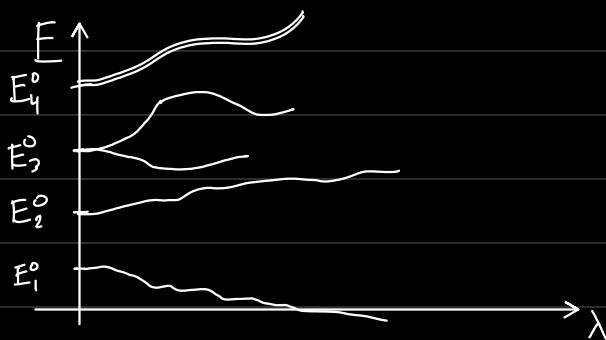
- e-valores de  $H_0$  conocidos (discreto)  $E_{p^0}$  son de  $H_0$   
índice entero

- e-vectores de  $H_0$  conocidos  $|\varphi_p^i\rangle$  por si hay degeneración

Los  $|\varphi_p^i\rangle$  forman una base ortonormal

$$\langle \varphi_p^i | \varphi_{p'}^i \rangle = \delta_{pp'} \delta_{ii'} \quad ; \quad \sum_p \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| = \mathbb{1}$$

Consideramos  $H(\lambda) = H_0 + \lambda \hat{W}$



a cada curva le corresponde al menos un e-vector.

Cuando  $\lambda \rightarrow 0$ , los e-valores de  $H \rightarrow$  e-valores de  $H_0$

Buscamos e-vectores  $|\psi_p(\lambda)\rangle$  y e-valores  $E_p(\lambda)$   
 para

$$H(\lambda) |\psi_p(\lambda)\rangle = E_p(\lambda) |\psi_p(\lambda)\rangle$$

Si escribimos

$$E(\lambda) = \underline{\epsilon_0} + \lambda \underline{\epsilon_1} + \lambda^2 \underline{\epsilon_2} + \dots = \sum_q \lambda^q \underline{\epsilon_q}$$

$$|\Psi(\lambda)\rangle = |\underline{\psi_0}\rangle + \lambda |\underline{\psi_1}\rangle + \lambda^2 |\underline{\psi_2}\rangle + \dots = \sum_q \lambda^q |\underline{\psi_q}\rangle$$

Enchutando estas ecuaciones en  $H(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle = E_p(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle$

$$(H_0 + \lambda \hat{W}) \left[ \sum_q \lambda^q |\Psi_q\rangle \right] = \left[ \sum_q \lambda^q \epsilon_q \right] \left[ \sum_q \lambda^q |\Psi_q\rangle \right]$$

$$(H_0 + \lambda \hat{W}) [|\psi_0\rangle + \lambda |\psi_1\rangle + \dots] = (\epsilon_0 + \lambda \epsilon_1 + \dots) [|\psi_0\rangle + \lambda |\psi_1\rangle + \dots]$$

Agrupando los coeficientes de  $\lambda$  con la misma potencia

$$\lambda^0 : H_0 |\psi_0\rangle = \epsilon_0 |\psi_0\rangle \quad \text{los términos de orden cero son los e-valores y e-vectores de } H_0.$$

$$\lambda^1 : H_0 |\psi_1\rangle + \hat{W} |\psi_0\rangle = \epsilon_0 |\psi_1\rangle + \epsilon_1 |\psi_0\rangle$$

$$\lambda^2 : H_0 |\psi_2\rangle + \hat{W} |\psi_1\rangle = \epsilon_0 |\psi_2\rangle + \epsilon_1 |\psi_1\rangle + \epsilon_2 |\psi_0\rangle$$

⋮

## Caso no degenerado

Consideremos un e-valor particular de  $H_0$ ,  $E_n^0$  con e-vector  $|\psi_n\rangle$

A primer orden

Queremos obtener

$$E(\lambda) = \underline{\epsilon_0} + \lambda \underline{\epsilon_1}$$

$$|\Psi(\lambda)\rangle = |\underline{\psi_0}\rangle + \lambda |\underline{\psi_1}\rangle$$

$$\epsilon_0 = E_n^0 ; |\psi_0\rangle = |\psi_n\rangle$$

$$\text{Usando } : (H_0 - \epsilon_0) |\psi_1\rangle + (\hat{W} - \epsilon_1) |\psi_0\rangle = 0$$

Multiplicando por  $\langle \psi_0 |$

$$\langle \psi_0 | H_0 - \epsilon_0 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_0 | \hat{W} - \epsilon_1 | \psi_0 \rangle = 0$$

$\underbrace{\langle \psi_0 | H_0 - \epsilon_0}_{\epsilon_0} | \psi_1 \rangle + \langle \psi_0 | \hat{W} - \epsilon_1 | \psi_0 \rangle = 0$

$$\epsilon_1 = \langle \psi_0 | \hat{W} | \psi_0 \rangle$$

$$\begin{aligned} \underline{E_n(\lambda)} &= \epsilon_0 + \lambda \epsilon_1 = E_n^0 + \lambda \langle \psi_n | \hat{W} | \psi_n \rangle \\ &= \underline{E_n^0 + \langle \psi_n | W | \psi_n \rangle} \end{aligned}$$

La corrección a orden 1 de la energía es el valor esperado de la perturbación.