

Partículas Idénticas

- ¿Cómo se describe cuánticamente un sistema formado por partículas idénticas con los electrones de un átomo?
- ✓ La discusión de este tópico nos llevará al estudio de fenómenos en mecánica cuántica que no tienen análogos clásicos.
 - ✓ Ver Fig. 9-1, pag. 302, Eisberg-Resnick, inglés, 2^{da} edic.
 - ✓ Consideremos un sistema formado por dos partículas idénticas que están dentro de una caja rebotando contra las paredes y ocasionalmente chocando entre ellas, todo esto en forma elástica.
 - En física clásica, podemos observar la evolución del sistema, sin perturbarlo, tomando una película del sistema como se muestra en la Fig. 9-1.
 - Cada partícula (puede ser un electrón) sigue una trayectoria bien definida de tal forma que la observación constante del sistema permite distinguir las partículas a pesar de ser idénticas.
 - En física clásica podemos distinguir partículas que son idénticas usando métodos que no afectan el comportamiento de cada partícula y de esta forma podemos etiquetar a las partículas.

- 2
- En mecánica cuántica no se puede hacer lo que se hace en mecánica clásica porque el principio de incertidumbre no permite observar el movimiento de las partículas en forma constante sin cambiar el comportamiento de las partículas.

Los fotones que se usan para iluminar (visualizar) a las partículas interactúan con ellas y modifican sus trayectorias (por ejemplo) de una forma impredecible.

Cualquier intento de distinguir a las partículas afecta en manera considerable su comportamiento.

- En mecánica cuántica, la extensión de la función de onda asociada a una partícula puede llevar al solapamiento de esta función de onda con la función de onda de otra partícula idéntica lo que haría difícil saber cuál función de onda está asociada a cuál partícula.
- Hay una diferencia fundamental entre la descripción clásica y la cuántica de un sistema de partículas idénticas. Un tratamiento mecánico-cuántico de un sistema de partículas idénticas

debe ser formulado de manera que la indistinguibilidad de las partículas idénticas sea incluida explícitamente en la teoría.

- Esto quiere decir que los resultados obtenidos a partir de cálculos mecánico-cuánticos (resultados que pueden ser confirmados experimentalmente) no deberían depender de la asignación de etiquetas (o identificadas) a las partículas idénticas. Esta característica conduce a efectos importantes que no tiene análogos clásicos ya que la indistinguibilidad es algo puramente mecánico-cuántico.

- Supongamos que tenemos por simplicidad un sistema de dos partículas idénticas que no interactúan entre ellas pero que cada una de ellas interactúa con las paredes de una caja cuántica en 3D.

- ✓ La masa de cada partícula es m .
- ✓ Las coordenadas cartesianas de la partícula 1 son (x_1, y_1, z_1) .
- ✓ Las coordenadas cartesianas de la partícula 2 son (x_2, y_2, z_2) .
- ✓ La energía potencial total del sistema es
$$U_T = U_T(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$$
.
- ✓ La energía total del sistema es E_T .

✓ La autofunción del sistema es

$$\Psi_T = \Psi_T(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2).$$

✓ La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial z_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \Psi_T}{\partial z_2^2} \right) + U_T \Psi_T = E_T \Psi_T \quad (1)$$

- Al asignar etiquetas (o identificadas) a las partículas (x_1, y_1 y z_1 para la partícula 1 ; x_2, y_2, z_2 para la partícula 2) se corre el riesgo de "violarse" el requerimiento de indistinguibilidad de que las predicciones (obviamente teóricas) que pueden ser medidas (obviamente a partir de experimentos) no deben depender de la asignación de etiquetas a las partículas idénticas de un sistema.
- Más adelante se verá que ciertas combinaciones lineales de autofunciones etiquetadas generan autofunciones del sistema cuyas predicciones (también medibles a partir de experimentos) son independientes de las etiquetas asignadas a las partículas del sistema.

- ✓ Hemos supuesto que las partículas del sistema no interactúan entre ellas. Se dice entonces que las partículas "se mueven independientemente". Esto implica que la energía potencial del sistema U_T es la suma de las energías potenciales de las partículas, siendo cada energía potencial debida a la interacción de cada partícula con las paredes de la caja 3D donde se encuentra.

$$U_T(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = U(x_1, y_1, z_1) + U(x_2, y_2, z_2) \quad (2)$$

Hay que notar que la independencia del movimiento de cada partícula se expresa matemáticamente en el lado derecho de la ecuación (2) por el hecho de que cada término depende solamente de las coordenadas (x, y, z) de una partícula.

- ✓ A partir de la técnica de separación de variables se comprueba que la ecuación de Schrödinger (ecuación (1)) con el potencial U_T dado por la ecuación (2), tiene soluciones del tipo

$$\Psi_T(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \Psi(x_1, y_1, z_1) \Psi(x_2, y_2, z_2) \quad (3)$$

donde $\Psi(x_1, y_1, z_1)$ y $\Psi(x_2, y_2, z_2)$ satisfacen 6
ecuaciones de Schrödinger (para una sola partícula)
independientes del tiempo idénticas.

✓ Es importante observar que la ecuación (3) significa que la autofunción que describe al sistema de partículas Ψ_T puede obtenerse a partir de las autofunciones que describen individualmente a cada partícula del sistema ($\Psi(x_1, y_1, z_1)$ y $\Psi(x_2, y_2, z_2)$) cuando se supone que las partículas no interactúan entre ellas sino que interactúan con un "agente externo" (las paredes de la caja).

Notación • Cada autofunción que describe una partícula se caracteriza a través de 3 números cuánticos que especifican la forma matemática de la dependencia de la autofunción en las tres coordenadas espaciales (x, y, z) ó (r, θ, ϕ) ó (ρ, φ, z) , dependiendo del sistema de coordenadas que se use. Además, cada autofunción asociada a una partícula requiere de un número cuántico

que especifique el spin de la partícula.

- Sea α = conjunto de 4 números cuánticos (3 espaciales y uno de spin) que especifican la autofunción de una partícula cuyo vector posición es $\vec{r} = (x, y, z)$.
- La autofunción de la partícula puede representarse como $\Psi_{\alpha}(x, y, z)$.
- Si se tienen dos partículas ^{idénticas} etiquetadas (o identificadas) por los números 1 y 2, estando la partícula 1 en un estado cuántico (single-particle o one-particle) especificado por un conjunto α de 4 números cuánticos y siendo el vector posición de la partícula $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$; estando la partícula 2 en un estado cuántico (single-particle o one-particle) especificado por un conjunto β de 4 números cuánticos y siendo el vector posición de la partícula $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$, entonces una solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación (1)) puede escribirse como

$$\Psi_T(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \Psi_{\alpha}(x_1, y_1, z_1) \Psi_{\beta}(x_2, y_2, z_2) \quad (4)$$

que también puede escribirse como

$$\Psi_T(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \Psi_\alpha(1) \Psi_\beta(2) \quad (5)$$

- La ecuación (5) indica que la partícula 1 está en el estado cuántico especificado por el conjunto α de 4 números cuánticos y la partícula 2 se encuentra en el estado cuántico especificado por el conjunto β de 4 números cuánticos.

Esto se dice también de la siguiente forma: la partícula 1 (localizada espacialmente en $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$) está en el estado cuántico α y la partícula 2 (localizada espacialmente en $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$) está en el estado cuántico β .

- Si en lugar de estar la partícula 1 en el estado α , está en el β y si en lugar de estar la partícula 2 en el estado β , está en el α , entonces otra solución de la ecuación de Schrödinger es

$$\Psi_T'(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \Psi_\beta(1) \Psi_\alpha(2) \quad (6)$$

✓ ¿ Son las cantidades físicas (medibles experimentalmente) que se pueden predecir a partir de la solución de la ecuación de Schrödinger que se muestra en (5) independientes de las etiquetas que tienen las partículas en esa ecuación?

• Para responder esta pregunta, vamos a utilizar la cantidad física más simple que puede ser calculada y a la vez determinada experimentalmente como lo es la densidad de probabilidad $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$.

✓ ¿ Es la densidad de probabilidad asociada a la función Ψ_T (mostrada en la ecuación (5)) independiente de la identificación de las partículas idénticas?

• Si fuese así, al intercambiar las etiquetas 1 y 2, la densidad de probabilidad sería la misma. Veamos:

- La densidad de probabilidad usando la función Ψ_T de la ecuación (5) es

$$|\Psi_T|^2 = \Psi_T^* \Psi_T = \Psi_{\alpha(1)}^* \Psi_{\beta(2)}^* \Psi_{\alpha(1)} \Psi_{\beta(2)} \quad (7)$$

- Si intercambiamos 1 y 2, la densidad de probabilidad es

$$|\Psi_T'|^2 = \Psi_T'^* \Psi_T' = \Psi_{\alpha(2)}^* \Psi_{\beta(1)}^* \Psi_{\alpha(2)} \Psi_{\beta(1)} \quad (8)$$

- Es claro que la densidad de probabilidad $|\Psi_T'|^2$ calculada al intercambiar las etiquetas de las partículas (ecuación (8)) no es igual a la densidad de probabilidad $|\Psi_T|^2$ calculada antes del intercambio de etiquetas.

- Esto no debe ser porque las partículas son idénticas.

- Lo mismo pasa si se usa la función Ψ_T' de la ecuación (6).

- Concluimos entonces que ni la función Ψ_T de la ecuación (5) ni la función Ψ_T' sirven para describir un sistema constituido por dos partículas idénticas.

Sin embargo, las siguientes combinaciones lineales Ψ_S y Ψ_A de las soluciones Ψ_T y Ψ_T' (mostradas respectivamente en las ecuaciones (5) y (6)) son también soluciones de la ecuación de Schrödinger convenientes en cuanto al requisito de independencia de la etiquetas discutido en este documento:

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha(1) \Psi_\beta(2) + \Psi_\beta(1) \Psi_\alpha(2) \right] \quad (9)$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_\alpha(1) \Psi_\beta(2) - \Psi_\beta(1) \Psi_\alpha(2) \right] \quad (10).$$

Ψ_S = autofunción del sistema simétrica.

Ψ_A = autofunción del sistema antisimétrica.

- ✓ Tanto $\Psi_T = \Psi_a(1)\Psi_b(2)$ como $\Psi_T' = \Psi_b(1)\Psi_a(2)$ son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (ecuación (1)) correspondientes a la misma energía total E_T .
- ✓ La linealidad de la ecuación de Schrödinger implica que una combinación lineal de Ψ_T y Ψ_T' como Ψ_S (ecuación (9)) o Ψ_A (ecuación (10)) es también solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente a la misma energía total E_T .
- ✓ Al intercambiar 1 y 2 en la ecuación (9) (intercambio de etiquetas), la autofunción resultante Ψ_S' es igual a la original Ψ_S , y por lo tanto la densidad de probabilidad $|\Psi_S'|^2 = \Psi_S'^* \Psi_S'$ es igual a $|\Psi_S|^2 = \Psi_S^* \Psi_S$, implicando esto que la densidad de probabilidad no depende de las etiquetas de las partículas o se puede también decir que es invariante ante el intercambio de etiquetas.

- ✓ Al intercambiar 1 y 2 en la ecuación (10) correspondiente a la autofunción antisimétrica Ψ_A , la autofunción resultante es el negativo de la original, esto es

$$\Psi_A' = -\Psi_A \quad (11)$$

- ✓ Por eso esta función se denomina antisimétrica.

Sin embargo la densidad de probabilidad después del intercambio de etiquetas $\Psi_A'^* \Psi_A'$ es igual a la densidad de probabilidad $\Psi_A^* \Psi_A$ original.

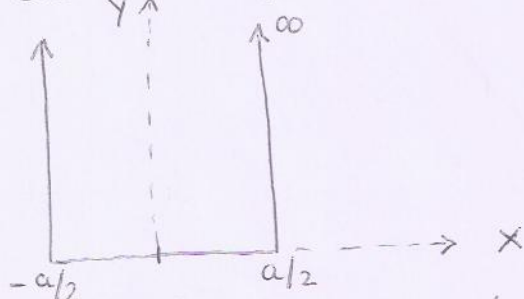
- ✓ Al igual que en el caso de la autofunción simétrica Ψ_S , la autofunción antisimétrica Ψ_A es una solución de la ecuación de Schrödinger a partir de la que se calculan cantidades físicas que no dependen de la identificación de las partículas, como debe ser en un sistema de partículas idénticas.

✓ A pesar de que las etiquetas 1 y 2 aparecen en las expresiones matemáticas de Ψ_S (ec. (9)) y Ψ_A (ecuación (10)), estas identificaciones no violan el requisito de indistinguibilidad discutido en este documento pues el valor de cualquier cantidad física (medible) obtenida a partir de estas autofunciones es independiente de la asignación de etiquetas.

✓ Leer y hacer (en detalle) el ejemplo 9-1, pag. 306, Eisberg - Resnick, inglés, 2da edición.

(Sistema de dos partículas idénticas que se mueven independientemente dentro de una caja 1D cúbica de lado a)

- Nota: no se considera el spin de las partículas



- Estudiar y comprender la propiedad denominada Ortogonalidad que se aplica a dos autofunciones diferentes cualquiera de cualquier energía potencial U particular.
- En este problema se maneja mucha información sumamente imputante. Su lectura es obligatoria.