

CORRELACION SIN INTERACCIÓN EN SISTEMAS DE FERMIONES

Alvaro Francisco Huertas Rosero
Departamento de Física, Universidad de los Andes

Abril 18 del 2001

RESUMEN

En este trabajo se examinan a un nivel elemental las correlaciones en estados puros y mezclados de un sistema de fermiones no interactuantes, debidas a la condición de antisimetría respecto al intercambio de partículas. Se deriva además una densidad de correlación para fermiones en un pozo infinito monodimensional, y se examina para diferentes números de partículas y para algunos estados excitados.

ABSTRACT

In this work the correlation between non-interacting fermions arising from antisymmetry is examined in pure and mixed states at an elementary level. As an example, correlation density is computed and plotted for basal and excited states of different numbers of fermions confined in an infinite monodimensional well.

INTRODUCCIÓN

Se sabe que para construir estados puros de muchas partículas se puede emplear una base de productos directos de estados de una partícula:

$$|1,2,3,\dots,N\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle\otimes|n_3\rangle\otimes\dots|n_N\rangle \quad (1)$$

Decir que las partículas son indistinguibles equivale a decir que cualquier estado puro generado intercambiando dos de las partículas en este producto es equivalente al original.

Como el valor esperado de cualquier operador se calcula con el vector de estado y su vector adjunto, un cambio de signo no se refleja en él, y la equivalencia entre dos estados no es afectada por un cambio de signo. Aparecen dos posibilidades para que el intercambio de dos partículas genere un estado equivalente: cambiando el signo (antisimetría respecto a la permutación) y dejando el signo igual (simetría de permutación). La primera es característica de los **fermiones** y la segunda de los **bosones**. [1]

Cuando se impone la antisimetría respecto al intercambio de partículas este producto debe entenderse como un determinante de Slater, es decir, una suma algebraica de todos los posibles productos internos de los estados $n_1, n_2, n_3, \dots, n_N$ con signos dados por la paridad de las permutaciones que los generan.

Cuando se necesita describir un estado en el que no se tiene información completa de ningún observable, hay que construir un **operador densidad** sumando **proyectores sobre estados puros** ponderados por probabilidades. Cuando este operador consta de más de un proyector, se tiene lo que se llama un **estado mezclado**. [2]

Como se genera en base a estados puros antisimétricos, un estado mezclado de varios fermiones tampoco tiene términos con dos o más estados de partícula individual iguales en distintos subespacios.

El proyector se genera con un producto diádico de un ket con su bra respectivo:

$$P(|a\rangle) = |a\rangle\langle a| \quad (2)$$

El operador densidad es entonces

$$\rho = \sum_i P_i |a_i\rangle\langle a_i| \quad (3)$$

Ahora bien, para hablar de correlación examinaremos la definición clásica de correlación entre dos eventos, que se basa en la probabilidad de que ocurran ambos:

$$P(1y2) = P(1)P(2) + C(1,2) \quad (4)$$

donde C es la correlación

Podemos definir una correlación entre estados de un fermión y otro extendiendo la expresión para la probabilidad clásica por una para el operador densidad del sistema total, y :

$$\begin{aligned} P(|a(1)\rangle \text{ y } |b(2)\rangle) &= \langle b(2)|\langle a(1)| \rho |a(1)\rangle|b(2)\rangle \\ &= \langle a(1)| \rho_1 |a(1)\rangle \langle b(2)| \rho_2 |b(2)\rangle + C(a(1),b(2)) \end{aligned} \quad (5)$$

es decir

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2 + C \quad (6)$$

Donde

$$C(a(1),b(2)) = \langle b(2)|\langle a(1)| \rho |a(1)\rangle|b(2)\rangle - \langle a(1)|\rho|a(1)\rangle \langle b(2)|\rho|b(2)\rangle \quad (7)$$

El operador C es entonces el operador de correlación. Este tiene traza cero y se transforma bajo cambios de base en 1 y 2 como un tensor de rango 2, por lo que suele llamarse tensor de correlación. [3]

Por otro lado, para un estado puro de N fermiones, el operador densidad se construye como el producto diádico de un determinante de bras y uno de kets :

$$R = \text{Det}[|n1\rangle \otimes |n2\rangle \otimes \dots \otimes |nN\rangle] * \text{Det}[\langle n1| \langle n2| \otimes \dots \otimes \langle nN|] \quad (8)$$

Como los determinantes exigen que todos los estados sean diferentes, los productos entre términos de bras y kets no pueden contener factores iguales para dos partículas diferentes. En un término cualquiera:

$$\begin{aligned} (|n1\rangle \otimes |n2\rangle \otimes \dots \otimes |nN\rangle) (\langle n1| \langle n2| \otimes \dots \otimes \langle nN|) &= \\ = |n1\rangle \langle m1| \otimes |n2\rangle \langle m2| \otimes \dots \otimes |nN\rangle \langle mN| \end{aligned} \quad (9)$$

SIMETRÍA DEL OPERADOR DENSIDAD:

si en el determinante de los kets hay un término

$$|m1\rangle |m2\rangle \dots |mN\rangle$$

el término correspondiente en los bras tendrá el mismo signo, y el producto directo de ambos será

$$|m_1\rangle\langle m_1| \otimes |m_2\rangle\langle m_2| \otimes |m_3\rangle\langle m_3| \otimes \dots \otimes |m_N\rangle\langle m_N|$$

que es simétrico respecto a intercambio de partículas.

Hay productos diádicos cruzados de diferentes términos de kets y bras que no son simétricos respecto a intercambio, como:

$$|a_1\rangle\langle b_2| \otimes |b_2\rangle\langle a_1| \otimes |n_3\rangle\langle n_3| \otimes \dots \otimes |m_N\rangle\langle m_N|$$

pero cada uno de ellos tiene un término asociado con el mismo signo que al sumarse hace un total simétrico.

$$|a_1\rangle\langle b_2| \otimes |b_2\rangle\langle a_1| \otimes |n_3\rangle\langle n_3| \otimes \dots \otimes |m_N\rangle\langle m_N| \\ + |b_2\rangle\langle a_1| \otimes |a_1\rangle\langle b_2| \otimes |n_3\rangle\langle n_3| \otimes \dots \otimes |m_N\rangle\langle m_N|$$

Estos términos son negativos en un estado antisimétrico y positivos en uno simétrico. Por ello, en un estado antisimétrico con dos estados a_1 y b_2 iguales, estos términos se cancelarían con otro par equivalente. Por lo tanto, son los signos con que aparecen estos términos cruzados los que marcan la diferencia entre las densidades de fermiones y bosones.

SON LOS OPERADORES DENSIDAD DE ESTOS ESTADOS FACTORIZABLES ?

Examinemos como sería un operador densidad que fuera simplemente un producto :

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \rho_3 \otimes \dots \otimes \rho_N \quad (11)$$

Como ? debe ser simétrico y estar compuesto por un solo término, todos los factores que lo conforman deben ser iguales, cada uno una combinación equiprobable de los proyectores sobre todos los estados. $\rho_i = (1/N) \sum_i |n_i\rangle\langle n_i|$ (12)

El operador densidad producto tendría N^N productos directos, correspondientes a todas las posibles combinaciones de los N estados en todos los órdenes posibles.

A este operador simétrico le llamaremos densidad factorizable.

CUAL ES ENTONCES LA CORRELACIÓN?

Volviendo a la definición cuántica de correlación (6):

$$C = \rho_{\text{total}} - \rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \rho_3 \otimes \dots \otimes \rho_N \quad (13)$$

$$C = \rho_{\text{total}} - \rho_{\text{factorizable}} \quad (14)$$

Los términos comunes a ambos operadores estarán en la correlación con un factor de $(1/N! - 1/N^N)$, que es la diferencia de las constantes de normalización. Este factor, como se ve, es positivo. Los que en uno sean positivos y en el otro negativos aparecen con un factor de $-(1/N! + 1/N^N)$.

Los términos con factores repetidos, que no aparecen en ρ_{total} aparecen en la correlación con un factor de $1/N^N$

EL HUECO DE FERMI

La correlación que se acaba de describir, consecuencia de la naturaleza antisimétrica de las amplitudes de probabilidad, aparece en sistemas de fermiones aunque estos no interactúen.

Su aspecto más conocido es sin duda el **Hueco de Fermi**, que es como se le llama a la disminución en la densidad de probabilidad de encontrar una partícula cerca a otra en el espacio.

Para estudiar este fenómeno es necesario definir un operador densidad para **dos partículas**, para lo cual es necesario **reducir** el operador densidad calculando la traza sobre todos los subespacios menos los de dos partículas.

$${}^2\rho = \text{Tr}_{3,4,\dots,N} [\rho] \quad (15)$$

Tomar la traza sobre el subespacio de una partícula equivale a reemplazar el factor correspondiente del producto directo por su traza. La traza de los proyectores ($|a\rangle\langle a|$) es siempre uno, pero la traza de productos externos entre un bra y un ket diferentes es cero :

$$\text{Tr} (\rho|a\rangle\langle b|) = \delta_{a,b} \quad (16)$$

De modo que en el proceso de calcular la traza, muchos términos se anulan. Solo aportan al operador densidad reducido los que solo tienen proyectores en los espacios en los que se calcula la traza.

El operador densidad factorizable es :

$${}^2\rho_{\text{fact}} = (1/16N^2) \sum_{a_i, b_i} (|a_i\rangle + |b_i\rangle)\langle b_i| + \langle a_i| \otimes (|a_i\rangle + |b_i\rangle)\langle a_i| + \langle b_i| \quad (17)$$

El operador densidad total es :

$${}^2\rho = (1/4N(N-1)) \sum_{a_i, b_i} (|a_i\rangle\langle a_i| \otimes |b_i\rangle\langle b_i| - |a_i\rangle\langle b_i| \otimes |b_i\rangle\langle a_i| + |b_i\rangle\langle b_i| \otimes |a_i\rangle\langle a_i| - |b_i\rangle\langle a_i| \otimes |a_i\rangle\langle b_i|) \quad (18)$$

El operador de correlación reducido para fermiones, que es la diferencia entre los dos anteriores, es :

$$C = ((5-4N)/N)\rho - (1/16N^2) \sum_{a_i, b_i} (|a_i\rangle\langle a_i| \otimes |a_i\rangle\langle a_i| + |b_i\rangle\langle b_i| \otimes |b_i\rangle\langle b_i| + (|a_i\rangle\langle a_i| + |b_i\rangle\langle b_i|) \otimes (|a_i\rangle\langle b_i| + |b_i\rangle\langle a_i|) + (|a_i\rangle\langle b_i| + |b_i\rangle\langle a_i|) \otimes (|a_i\rangle\langle a_i| + |b_i\rangle\langle b_i|) - ((3+4N)/(4N(N-1)))(|a_i\rangle\langle b_i| \otimes |b_i\rangle\langle a_i| + |b_i\rangle\langle a_i| \otimes |a_i\rangle\langle b_i|) \quad (19)$$

Esta expresión explícita para la correlación de dos partículas promedio aún no puede ilustrar el Hueco de Fermi, ya que este no se refiere a correlaciones en cualquier tipo de estados, sino a correlaciones **espaciales**.

Para eso hay que pasar la correlación a la representación de coordenadas, así :

$$R(x_1, x_2; x_1', x_2') = \langle x_2| \langle x_1| \rho (|x_1\rangle |x_2\rangle) \quad (20)$$

Para pasar a esta representación se tiene en cuenta que $\langle x_2 | n_1 \rangle$ corresponde a la función de onda para el estado n_1 en términos de x_2 , es decir

$$\langle x_2 | n_1 \rangle = \Psi_{n_1}(x_2) \quad (21)$$

Con esta representación del operador densidad, se puede calcular las probabilidades de una configuración con una partícula en la posición x_1 y otra en la posición x_2 así :

$$P(x_1, x_2) = \iint R(x_1, x_2; x_1', x_2') \delta(x_1 - x_1') \delta(x_2 - x_2') dx_1' dx_2' \quad (22)$$

$$P(x_1, x_2) = R(x_1, x_2; x_1, x_2) \quad (23)$$

EL HUECO DE FERMI EN EL POZO INFINITO MONODIMENSIONAL

Se puede ilustrar fácilmente este fenómeno con un sistema físico sencillo, como lo es el pozo infinito monodimensional. Se ha probado que en una dimensión el carácter fermiónico o bosónico de las partículas no es absoluto [1], pero en lo que

sigue supondremos que restringimos el intercambio de unos en otros en nuestro sistema. Las funciones de onda para este sistema son :

$$\Psi_n(x) = (2/L)^{1/2} \text{sen}(n\pi x/L) \quad (24)$$

Haciendo $L=1$ y reemplazando :

$$R_B(x_1, x_2) = (1/4N^2)_{a,b} ((\text{sen}(a\pi x_1) + \text{sen}(b\pi x_1))^2 (\text{sen}(a\pi x_2) + \text{sen}(b\pi x_2))^2) \quad (25)$$

$$R_F(x_1, x_2) = (1/N(N-1)) \sum_{a_i, b_i} (\text{sen}^2(a\pi x_1) \text{sen}^2(b\pi x_2) + 2\text{sen}(a\pi x_1)\text{sen}(b\pi x_1)\text{sen}(a\pi x_2)\text{sen}(b\pi x_2) + \text{sen}^2(b\pi x_1) \text{sen}^2(a\pi x_2)) \quad (26)$$

$$C = (3N+1)/(N^2(N-1)) R_F(x_1, x_2) - (1/4N^2) \sum_{a_i, b_i} (\text{sen}^2(a\pi x_1) \text{sen}^2(a\pi x_2) + (\text{sen}(a\pi x_1) \text{sen}(b\pi x_1)(\text{sen}^2(a\pi x_2) + \text{sen}^2(b\pi x_2)) + (\text{sen}^2(a\pi x_1) + \text{sen}^2(b\pi x_1)) (\text{sen}(a\pi x_2) \text{sen}(b\pi x_2) + \text{sen}^2(b\pi x_1)\text{sen}^2(b\pi x_2)) \quad (27)$$

Graficando estas cantidades para los estados basales de dos, cuatro y 16 partículas en el pozo se obtiene:

figura 1a Densidad de probabilidad para dos fermiones

figura 1b Correlación para dos fermiones

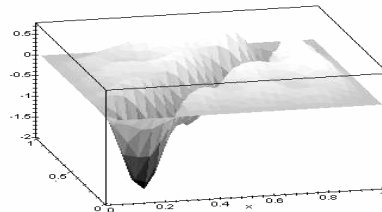
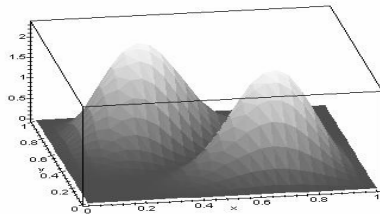


figura 2a Densidad de probabilidad para cuatro fermiones

figura 2b Correlación para cuatro fermiones

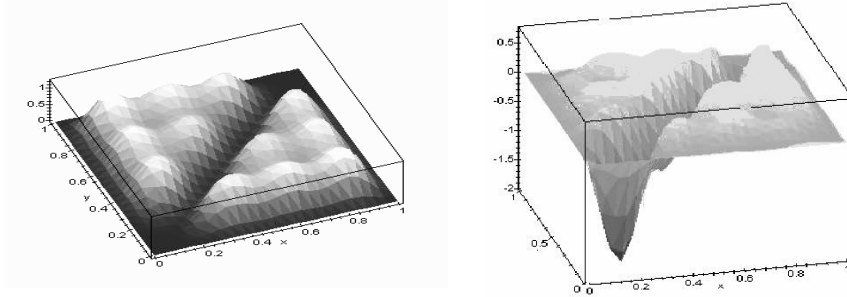
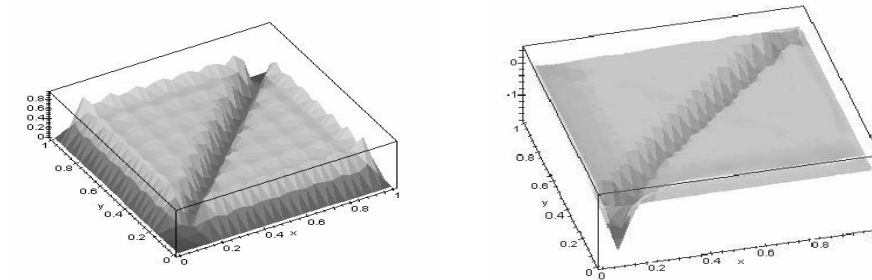


figura 3a Densidad de probabilidad para 8 fermiones

figura 3b Correlación para 8 fermiones



Estas gráficas dan una idea muy intuitiva y clara de que la densidad de fermiones se acumula lejos de las configuraciones donde dos de las partículas están cerca.

Puede verse que si se integra en la dirección de $x_1 = x_2$ para obtener la función de distribución de pares [4], se estarían recogiendo muchas irregularidades del perfil de distribución de probabilidades, que impide tener una apreciación más limpia de los efectos puramente correlativos.

Encontramos que la condición de antisimetría se refleja en una correlación entre partículas que no interactúan, ya que aunque cada partícula no es afectada por el estado en que se encuentre otro fermión en el sistema, no puede acceder a ese estado. Esto hace un efecto similar al de una repulsión entre las dos, pero que no depende directamente de la energía.

Cuando se trata de partículas interactuantes con un potencial de rango finito, un sistema de bosones con potencial de repulsión puede simular un sistema de fermiones, y uno de fermiones con potencial de atracción puede simular uno de bosones. [1]

Al acumular partículas, la distribución de probabilidades para distintas distribuciones se hace más plana, pero se hace más nítido el hueco de correlación (si bien un poco más estrecho).

Para estados excitados del sistema con cuatro fermiones, se observa una densidad y una correlación así :

figura 4a Densidad de probabilidad para el primer estado excitado del sistema de 4 fermiones

figura 4b Correlación para el primer estado excitado del sistema de 4 fermiones

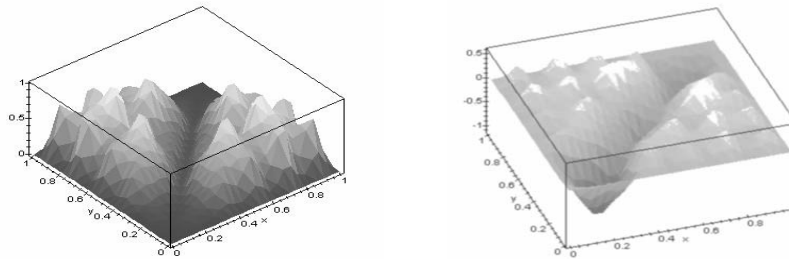
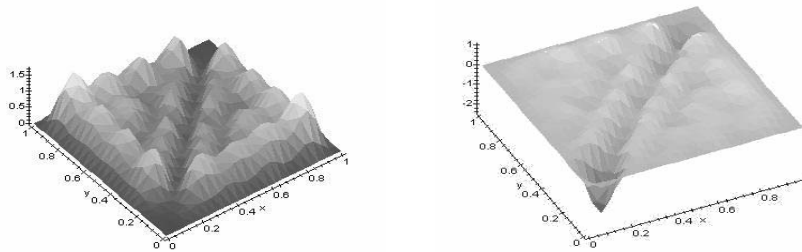


figura 5 Densidad para estado doblemente excitado del sistema de 4 fermiones

figura 5b Correlación para estado doblemente excitado del sistema de 4 fermiones



Puede observarse que en los estados excitados el hueco de Fermi se hace aún más acentuado, lo cual hace esperar que en estados de equilibrio térmico este fenómeno no solo no desaparece sino que se acentúa más, debido a que hay más estados excitados simétricos que se excluyen de al construir la densidad, estados que por ser simétricos, tienen justamente máximos sobre la línea $x_1 = x_2$, si bien cada vez más altos y estrechos. Estos máximos contribuyen en la función de correlación con valores negativos, dando lugar a una cresta de mínimos.

CONCLUSIONES

El principio de exclusión de Pauli impone una correlación importante en sistemas de varios (muchos) fermiones, que observamos en el pozo monodimensional como un hueco en la densidad de probabilidad para configuraciones con pares de partículas cercanas.

Cuando existe un entrelazamiento adicional, la correlación por exclusión sigue estando presente, aunque añadida a los demás efectos. Por eso, las medidas de entrelazamiento (que es en general correlación cuántica) son diferentes para fermiones

y bosones, y se definen para los primeros medidas maximales basadas en representabilidad con productos de determinantes de Slater. [5]

El hueco parece tener más largo alcance en longitud en estados de baja energía, pero no desaparece en estados excitados, y es de esperar que tampoco en estados térmicos, aún a temperaturas relativamente altas que permitan la figuración palpable de estados muy excitados.

Por lo tanto, este puede ser un efecto cuántico importante aún en sistemas que se encuentren en estados de equilibrio térmico.

NOTAS

(^A)En este trabajo se denota el producto directo como un producto no conmutativo, ya que no se indica a que partícula se refiere cada factor, sino que se adopta un orden de los subespacios que es el mismo de las partículas correspondientes. Esto, sin embargo, no afecta ninguno de los cálculos ni resultados.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Cheon, Taksu y Shigehara, T.
"fermion–Boson Duality in One–Dimensional Particles"
e–print : Quant –Ph/9806041 31 agosto 1998
- [2] Fano, U.
"Description of states in Quantum Mechanics by Density Matrix and operator techniques"
Rev. Mod. Phys, **29**, 76 (1957)
- [3] Mahler, Günter y Weberruß, Volker A. U.
"Quantum Networks : Dynamics of open nanostructures"
página 123
Springer, Berlin, 1995
- [4] Folde, Peter
"Electronic correlation in molecules and solids"
página 31
Springer, Berlin, 1995
- [5] Sliemann, John ; Cirac, J. Ignacio ; Ku?, Marek ; Lewenstein, Maciej y Loss, Daniel
"Quantum Correlations in Two–Fermion Systems"
página 2
e–print : Quant –Ph/0012094 v2 20 abril 2001