

**Particelle identiche : schema**  
(per uno studio più dettagliato vedi lezione 2)

Funzioni d'onda di un sistema composto

Sistema costituito da due particelle (eventualmente identiche)

$$\begin{array}{ccc} \mathbf{H}_1 & \otimes & \mathbf{H}_2 & = & \mathbf{H} \\ \in & & \in & & \in \\ {}_1(\vec{r}_1) & & {}_2(\vec{r}_2) & & (\vec{r}_1, \vec{r}_2) = {}_1(\vec{r}_1) {}_2(\vec{r}_2) \end{array}$$

stato (iniziale) del sistema

$$\begin{array}{ll} {}_0 = {}_1(\vec{r}_1) {}_2(\vec{r}_2) & \overline{{}_0} = {}_1(\vec{r}_2) {}_2(\vec{r}_1) \\ \text{particelle non sovrapposte} & \text{scambio delle particelle} \\ \\ {}_0 = {}_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) & \overline{{}_0} = \overline{{}_0}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \\ \text{particelle sovrapposte} & \text{scambio delle particelle} \end{array}$$

**Degenerazione di scambio**

Le due funzioni d'onda  ${}_0$  e  $\overline{{}_0}$  sono in linea di principio diverse, e potrebbero essere anche ortogonali.

D'altra parte se le due particelle sono identiche, per definizione tali funzioni d'onda rappresentano lo stesso stato dinamico!

Tutti i possibili stati 'degeneri per scambio' sono generati da  ${}_0$  e  $\overline{{}_0}$ , e questo sottospazio da loro generato lo chiameremo sottospazio di degenerazione per scambio.

**Stati a simmetria definita**

A partire dai due stati di singola particella  $\mathbf{f}_1$  e  $\mathbf{f}_2$  possiamo costruire degli stati del sistema composto dalle due particelle che sono simmetrici o antisimmetrici per scambio di particelle, e cioè che rimangono immutati o cambiano di segno rispettivamente se vengono scambiate le particelle :

$$\begin{aligned} {}^{(S)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [ {}_1(\vec{r}_1) {}_2(\vec{r}_2) + {}_1(\vec{r}_2) {}_2(\vec{r}_1) ] \\ {}^{(A)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [ {}_1(\vec{r}_1) {}_2(\vec{r}_2) - {}_1(\vec{r}_2) {}_2(\vec{r}_1) ] \end{aligned}$$

Ricapitolando :

Dati due stati di singola particella, e considerato il sistema composto da due particelle

identiche, possiamo costruire una coppia di stati (del sistema composto) degeneri per scambio, e due stati (del sistema composto) a simmetria definita.

Nota :

Gli stati a simmetria definita possono essere costruiti anche a partire da stati che non sono il prodotto di funzioni di singola particella, cioè a partire da stati in cui le particelle sono 'sovrapposte' :

$${}^{(S)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \right]$$

$${}^{(A)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \right]$$

### Proprietà di simmetria della funzione d'onda

Questi stati a simmetria definita sono 'più interessanti', per alcune loro proprietà che ora mostreremo, e il sottospazio da essi generato coincide con quello 'di degenerazione per scambio'.

Cominciamo col vedere due proposizioni sugli stati a simmetria definita.

**Proposizione** (sulla simmetria degli autostati) :

Un autostato dell'Hamiltoniana ha sempre simmetria definita, cioè la proprietà di simmetria o antisimmetria per scambio di particelle, o è posseduta dall'autostato (autostati non degeneri) o è ottenibile facilmente (autostati degeneri).

**dim.**

consideriamo un autostato dell'Hamiltoniana

$$H \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

**caso a)**  $E$  è non degenera

L'autostato  $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  è simmetrico o antisimmetrico per scambio di particelle.

infatti se l'autostato è non degenera, qualunque funzione d'onda che rappresenti quello stato deve appartenere alla classe di equivalenza degli elementi dello spazio di Hilbert che differiscono per una costante. D'altra parte se scambiamo le particelle la fisica del sistema non cambia, e dunque scambiando le particelle dobbiamo avere due autofunzioni relative allo stesso autovalore dell'energia.

In altre parole scambiando le particelle un'autofunzione non degenera deve differire solo per una costante moltiplicativa :

$$P \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_0(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = k \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

( $\mathbf{P}$  è l'operatore di permutazione delle particelle)

D'altra parte, riscambiando le particelle si deve riottenere la funzione di partenza :

$$\mathbf{P} \mathbf{P} \left( \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right) = \mathbf{P} \mathbf{k} \left( \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right) = |\mathbf{k}|^2 \left( \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right) = \left( \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right)$$

e dunque  $\mathbf{k}^2 = 1 \Rightarrow \mathbf{k} = \pm 1$

(n.b. non mi ricordo per quale motivo, ma poichè l'operatore in questione (l'Hamiltoniano) è hermitiano,  $\mathbf{k}$  è reale)

**caso b)**  $E$  è degenere

E' sempre possibile costruire autostati (dell'autospazio rel. all'autovalore degenere  $E$ ) che siano simmetrici o antisimmetrici per scambio delle particelle :

$${}^{(S)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2 \right) + \left( \vec{\mathbf{r}}_2, \vec{\mathbf{r}}_1 \right) \right]$$

$${}^{(A)}(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2 \right) - \left( \vec{\mathbf{r}}_2, \vec{\mathbf{r}}_1 \right) \right]$$

N.B. poichè scambiando le particelle la fisica del sistema non deve cambiare, le due funzioni  $Y(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  e  $Y(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$  appartengono sicuramente allo stesso autospazio degenere)

**Proposizione** (sulla 'conservazione' della simmetria)

la proprietà di simmetria o antisimmetria di uno stato si conserva durante l'evoluzione temporale.

dim.: [...]

**Proposizione** (sul sottospazio di degenerazione) :

Il sottospazio di degenerazione per scambio e il sottospazio generato dalla coppia di stati simmetrico e antisimmetrico coincidono.

dim. :

Consideriamo i due sottospazi in questione :

$$\left\{ \left( \vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2 \right), \left( \vec{\mathbf{r}}_2, \vec{\mathbf{r}}_1 \right) \right\}$$

(sottospazio generato da uno stato arbitrario e da quello ottenuto scambiando le particelle. Gli elementi di questo sottospazio individuano tutti lo stesso stato fisico, per definizione di particelle identiche)

$$\left\{ \begin{matrix} {}^{(S)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) , \\ {}^{(A)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \end{matrix} \right\}$$

(sottospazio generato da due autostati a simmetria definita, l'uno simmetrico e l'altro antisimmetrico per scambio di particelle. Tutti gli elementi di questo sottospazio non paralleli a quelli di base non hanno simmetria definita)

esplicitando le due funzioni d'onda che generano il secondo sottospazio

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{matrix} {}^{(S)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \\ {}^{(S)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \end{matrix} \right] , \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{matrix} {}^{(A)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \\ {}^{(A)}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \end{matrix} \right] \right\}$$

e confrontandoli con quelli del primo, vediamo che gli uni sono combinazione lineare degli altri. Infatti si passa da un sottospazio ad un altro per una trasformazione che è una rotazione, dal momento che  $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = 1$ .

CVD

### Difficoltà introdotta dalla degenerazione di scambio

Consideriamo il seguente stato di un sistema con due particelle identiche :

$$= \beta \begin{matrix} {}^{(S)} \\ {}^{(A)} \end{matrix}$$

con  $\beta$  e  $\alpha$  arbitrari ma tali che  $|\beta|^2 + |\alpha|^2 = 1$

Vediamo che si tratta di uno stato a simmetria non definita, che appartiene al sottospazio generato dai due stati simmetrico e antisimmetrico, e dunque al sottospazio di degenerazione. In altre parole le possibili scelte di  $\beta$  e  $\alpha$  'scorrono' il sottospazio di degenerazione.

Calcoliamo la probabilità di trovare una qualunque delle due particelle nel punto  $\vec{r}'$ , e l'altra particella in un punto  $\vec{r}''$ .

$$\begin{aligned} \Pr(\vec{r}', \vec{r}'') &= \left| \begin{matrix} {}^{(S)}(\vec{r}', \vec{r}'') \\ {}^{(A)}(\vec{r}'', \vec{r}') \end{matrix} \right|^2 + \left| \begin{matrix} {}^{(A)}(\vec{r}', \vec{r}'') \\ {}^{(S)}(\vec{r}'', \vec{r}') \end{matrix} \right|^2 \\ &= \left[ \begin{matrix} {}^{(S)}(\vec{r}', \vec{r}'') + \\ {}^{(A)}(\vec{r}', \vec{r}'') \end{matrix} \right] \\ &\quad \left[ \begin{matrix} {}^{(S)}(\vec{r}', \vec{r}'') + \\ {}^{(A)}(\vec{r}', \vec{r}'') \end{matrix} \right] \\ &+ \left[ \begin{matrix} {}^{(S)}(\vec{r}'', \vec{r}') + \\ {}^{(A)}(\vec{r}'', \vec{r}') \end{matrix} \right] \\ &\quad \left[ \begin{matrix} {}^{(S)}(\vec{r}'', \vec{r}') + \\ {}^{(A)}(\vec{r}'', \vec{r}') \end{matrix} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^S \rangle |^2 + | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^A \rangle |^2 + \\
 &+ | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^A \rangle |^2 + | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^S \rangle |^2 + \\
 &+ | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}'', \vec{r}' | \psi^S \rangle |^2 + | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}'', \vec{r}' | \psi^A \rangle |^2 + \\
 &+ | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}'', \vec{r}' | \psi^A \rangle |^2 + | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}'', \vec{r}' | \psi^S \rangle |^2 =
 \end{aligned}$$

utilizzando le proprietà di simmetria

$$\begin{aligned}
 &= | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^S \rangle |^2 + | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^A \rangle |^2 + \\
 &+ | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^S \rangle |^2 + | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^A \rangle |^2 + \\
 &+ | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^S \rangle |^2 - | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^A \rangle |^2 + \\
 &- | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^S \rangle |^2 + | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^A \rangle |^2 = \\
 &= 2 \left( | \psi^S |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^S \rangle |^2 + | \psi^A |^2 | \langle \vec{r}', \vec{r}'' | \psi^A \rangle |^2 \right)
 \end{aligned}$$

(note : ricordiamo che si vuole la probabilità che o l'una o l'altra particella si trovi in  $\vec{r}'$ , e dunque la probabilità è la somma delle probabilità dei due singoli eventi.

Notiamo inoltre che qui si tratta del modulo quadro di numeri complessi, e non della norma quadrata delle funzioni. Infatti si tratta del modulo quadro del valore complesso che le funzioni d'onda assumono in due punti fissati)

Ora, questa quantità è la probabilità che una misura dia un certo risultato, cioè la probabilità di avere una certa configurazione quando il sistema si trova in questo stato a simmetria non definita). Dunque si tratta di un'osservabile, e come possiamo vedere, questa osservabile dipende da  $\vec{r}'$  e  $\vec{r}''$ .

Dunque siamo giunti ad un assurdo : valori diversi di  $\vec{r}'$  e  $\vec{r}''$  (quello di cui dipende la probabilità), comportano valori di aspettazione diversi di un'osservabile, e d'altra parte valori diversi di  $\vec{r}'$  e  $\vec{r}''$  significano passare da uno stato degenero per scambio ad un altro.

Dunque potremmo stabilire in quale degli stati degeneri per scambio si trova il sistema : lo scambio di particelle è (legato ad un') osservabile!

E questo è assurdo perché le particelle sono identiche.

Per risolvere questa contraddizione introduciamo il seguente

### Postulato di simmetrizzazione

Lo stato di un sistema con (due o più) particelle identiche può essere solo una funzione d'onda simmetrica o antisimmetrica rispetto allo scambio di particelle.

In questo modo eliminiamo la degenerazione di scambio!

Ma lo abbiamo fatto "a forza", introducendo un postulato.

Quello che invece si riesce a dimostrare è un legame tra la proprietà di simmetria o

antisimmetria con lo spin delle particelle (la dimostrazione si fa nell'ambito della teoria dei campi relativistica) :

### Terorema spin-statistica

se un sistema è con particelle identiche e le particelle hanno spin semintero la funzione d'onda (del sistema) deve essere antisimmetrica rispetto allo scambio delle particelle (**fermioni**), se hanno spin intero la funzione d'onda deve essere simmetrica rispetto allo scambio delle particelle (**bosoni**).

(vedi anche lez.2)

### Determinante di Slater

Se l'Hamiltoniana del sistema è tale da poter essere scritta come somma di tante Hamiltoniane di singola particella, allora, se non tenessimo conto del postulato di simmetrizzazione, una autofunzione dell'Hamiltoniana sarebbe il prodotto delle autofunzioni di singola particella (separazione delle variabili).

Dovendo richiedere l'antisimmetria per scambio di una qualunque coppia di particelle, bisogna costruire una opportuna combinazione lineare di tali autofunzioni di singola particella.

Tale combinazione lineare risulta essere il determinante di una matrice (determinante di Slater) costruita mettendo in colonna tutte le diverse funzioni di singola particella, ed attribuendo ogni colonna ad una stessa particella (cioè le funzioni di ogni colonna dipendono da una stessa variabile di posizione) :

$$\begin{vmatrix} n_1(\vec{r}_1) & n_2(\vec{r}_1) & \dots & n_N(\vec{r}_1) \\ n_1(\vec{r}_2) & n_2(\vec{r}_2) & \dots & n_N(\vec{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ n_1(\vec{r}_N) & n_2(\vec{r}_N) & \dots & n_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

Se invece vogliamo costruire una funzione totalmente simmetrica utilizziamo il *permanente*, e cioè la somma di tutte le possibili permutazioni dei prodotti delle n funzioni di singola particella assegnate alle n particelle.