

# Sistemi di particelle identiche

## 1. Principio di indistinguibilità

Due particelle si dicono identiche se hanno le stesse caratteristiche fisiche, quali massa, spin, carica elettrica, momento magnetico. Col termine di particelle ci riferiamo qui non soltanto a particelle elementari come elettroni, protoni, ecc., ma anche a microsistemi più complessi, come atomi e molecole.

Nella meccanica classica le particelle identiche sono sempre distinguibili, poiché è possibile, almeno in linea di principio, determinare univocamente la traiettoria di ognuna di esse. Pertanto se in un sistema di  $N$  particelle identiche si assegnano a un dato istante degli indici  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) alle diverse particelle, ciascun indice  $i$  segue la particella  $i$ -esima nel suo moto e può essere associato all'intera traiettoria.

Nella meccanica quantistica la situazione è profondamente diversa. Infatti il principio di indeterminazione impedisce di misurare allo stesso istante  $t_0$  la posizione  $\mathbf{x}$  e la velocità  $\mathbf{v}$  di una particella e quindi di determinare la sua traiettoria. Se al tempo  $t_0$  abbiamo determinato la posizione delle  $N$  particelle nei punti  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ , le loro velocità rimangono del tutto indeterminate, e quindi anche le posizioni a un istante successivo risultano indeterminate. Se allora al tempo  $t > t_0$  troviamo una particella nel punto  $\mathbf{x}$ , non possiamo stabilire di quale particella si tratti.

Questa discussione mostra che in meccanica quantistica le particelle identiche, quando entrano in interazione o comunque quando i loro pacchetti d'onda si sovrappongono, perdono la propria individualità e diventano del tutto indistinguibili. Questo costituisce il cosiddetto *principio di indistinguibilità*, che è un nuovo principio fisico fondamentale, che ha conseguenze importanti per i sistemi di molte particelle. Nella sua forma più generale, comprendente anche il caso di particelle non interagenti o spazialmente separate, questo principio può essere formulato nel modo seguente: *il risultato di qualunque osservazione su un sistema di particelle identiche è indipendente dall'ordine delle particelle.*

## 2. Stati di $N$ particelle e operatori di permutazione

Consideriamo un sistema di  $N$  particelle identiche. Sia  $\mathcal{H}$  lo spazio di Hilbert degli stati di una singola particella e sia  $\{|q\rangle\}$  una base in  $\mathcal{H}$ , dove  $q$  indica un set completo di numeri quantici, discreti o continui, come ad es.  $q \equiv (\mathbf{x}, \alpha)$ , dove  $\alpha$  rappresenta altri eventuali numeri quantici. Se le particelle sono distinguibili, lo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_N$  dell'intero sistema è dato dal prodotto tensoriale degli spazi di Hilbert delle singole particelle:

$$(2.1) \quad \mathcal{H}_N = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(N)}$$

ed ha come base naturale i vettori

$$(2.2) \quad |q_1^{(1)}, q_2^{(2)}, \dots, q_N^{(N)}\rangle \equiv |q_1\rangle^{(1)} \otimes |q_2\rangle^{(2)} \otimes \dots \otimes |q_N\rangle^{(N)},$$

dove, per ragioni di chiarezza, abbiamo introdotto due serie di indici: quelli posti in alto fra parentesi indicano le particelle —qui considerate distinguibili—, mentre quelli posti in basso indicano gli stati quantici occupati. Così ad es.  $q_k^{(i)}$  indica che la particella  $i$  si trova nello stato  $q_k$ .

Per studiare le proprietà dei vettori di stato e delle osservabili per permutazioni delle particelle è utile introdurre gli operatori di permutazione. Sia  $p$  una permutazione di  $N$  oggetti, che ne cambia l'ordine da quello fondamentale  $(1, 2, \dots, N)$  a  $(p_1, p_2, \dots, p_N)$ . L'insieme delle permutazioni  $p$  forma un gruppo finito di  $N!$  elementi, detto gruppo delle permutazioni. Ad ogni permutazione  $p$  possiamo associare un operatore  $P(p)$  nello spazio  $\mathcal{H}_N$ , che cambia l'ordine delle particelle nei vettori di stato e negli operatori nel modo seguente:

$$(2.3) \quad P(p) | q_1^{(1)}, q_2^{(2)}, \dots, q_N^{(N)} \rangle = | q_1^{(p_1)}, q_2^{(p_2)}, \dots, q_N^{(p_N)} \rangle$$

$$(2.4) \quad P(p) A(q^{(i)}, p^{(i)}) P^{-1}(p) = A(q^{(p_i)}, p^{(p_i)})$$

Nella (2.4) l'operatore  $A$  è considerato come funzione degli operatori delle singole particelle, di cui i  $q$  corrispondono al set che caratterizza gli stati e i  $p$  sono altri operatori non commutanti.

Dalla definizione segue che anche gli operatori  $P$  formano un gruppo e che vale per essi la regola del prodotto

$$(2.5) \quad P(p_1) P(p_2) = P(p_1 p_2),$$

se il prodotto  $p_1 p_2$  di due permutazioni è definito eseguendo prima  $p_2$  e poi  $p_1$ .

Gli operatori  $P$  devono essere unitari

$$(2.6) \quad P^\dagger P = P P^\dagger = \mathbb{1}$$

affinché il prodotto scalare sia invariante per permutazioni delle particelle:

$$(2.7) \quad \langle P\psi_1 | P\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | P^\dagger P | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle, \quad \forall |\psi_{1,2}\rangle \in \mathcal{H}_N$$

Ogni permutazione  $p$  può essere espressa (in più modi) come prodotto di scambi fra due oggetti. Per esempio la permutazione ciclica di tre oggetti  $(1, 2, 3) \rightarrow (2, 3, 1)$ , che viene generalmente indicata col simbolo  $(1\ 2\ 3)$ , si può esprimere come  $(1\ 3)(2\ 3)$ , o anche come  $(2\ 3)(1\ 2)$ , o in altri modi ancora, ma sempre con un numero pari di scambi, poiché si tratta di una permutazione pari. Una permutazione si dice pari o dispari a seconda che si possa ottenere con un numero pari o dispari di scambi e si definisce la parità  $\eta_p$ , con  $\eta_p = +1$  se  $p$  è pari e  $\eta_p = -1$  se  $p$  è dispari. La parità del prodotto di due permutazioni è il prodotto delle parità:  $\eta_{p_1 p_2} = \eta_{p_1} \eta_{p_2}$ .

Indichiamo con  $P_{ij}$  l'operatore di scambio delle particelle  $i$  e  $j$ . Esso gode delle proprietà

$$(2.8) \quad P_{ij}^2 = \mathbb{1}, \quad P_{ij}^\dagger = P_{ij},$$

di cui la prima è evidente e la seconda segue dalla prima e dalla (2.6). Dalla prima di queste proprietà segue che gli autovalori di  $P_{ij}$  sono  $\pm 1$  e gli autovettori sono gli stati pari e dispari nello scambio di  $i$  e  $j$ .

Per i sistemi fisici hanno particolare importanza gli operatori

$$(2.9) \quad S = \frac{1}{N!} \sum_p P(p)$$

$$(2.10) \quad A = \frac{1}{N!} \sum_p \eta_p P(p)$$

dove la sommatoria è estesa a tutte le  $N!$  permutazioni delle particelle.

$S$  e  $A$  si chiamano rispettivamente *simmetrizzatore* e *antisimmetrizzatore*. Infatti, applicandoli al generico vettore della (2.3), che indicheremo sinteticamente con  $|1, 2, \dots, N\rangle$ , si vede subito che  $S|1, 2, \dots, N\rangle$  è simmetrico nello scambio di una qualunque coppia di particelle, mentre  $A|1, 2, \dots, N\rangle$  è antisimmetrico. Questo risultato si può ottenere in modo più formale usando la proprietà di gruppo (2.5), da cui segue

$$(2.11) \quad P(p) S = S, \quad P(p) A = \eta_p A.$$

In particolare per  $P(p) = P_{ij}$ , che è una permutazione dispari, si ottiene

$$(2.12) \quad P_{ij} S = S, \quad P_{ij} A = -A$$

e da queste, applicando al vettore  $|1, 2, \dots, N\rangle$ , si ottiene il risultato voluto.

Dalle definizioni (2.9) e (2.10), prendendo l'aggiunto e sfruttando le (2.6) e (2.5), si ottiene

$$(2.13) \quad S^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_p P^{-1}(p) = \frac{1}{N!} \sum_p P(p^{-1}) = S$$

$$(2.14) \quad A^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_p \eta_p P^{-1}(p) = \frac{1}{N!} \sum_p \eta_{p^{-1}} P(p^{-1}) = A$$

dove nell'ultimo passaggio si è cambiato nella sommatoria  $p^{-1}$  in  $p$  e si è usata la relazione  $\eta_p = \eta_{p^{-1}}$ .

Inoltre dalle (2.11) seguono le importanti proprietà

$$(2.15) \quad S^2 = S; \quad A^2 = A; \quad A S = S A = 0.$$

Le (2.13-15) mostrano che  $S$  e  $A$  sono due proiettori ortogonali. Osserviamo che in generale  $S + A \neq \mathbb{1}$ , salvo nel caso di due particelle, per cui si ha  $S = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + P_{12})$  e  $A = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - P_{12})$ .

### 3. Simmetria delle osservabili e dei vettori di stato

Vogliamo ora esaminare le conseguenze del principio di indistinguibilità sulle osservabili e sui vettori di stato. Sia  $B = B(q^{(i)}, p^{(i)})$  una osservabile del sistema e siano  $\beta$  un valore dello spettro di  $B$  (discreto o continuo) e  $|\beta\rangle$  un autovettore corrispondente (proprio o generalizzato), tali che

$$(3.1) \quad B|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle.$$

Il ket  $|\beta\rangle$  rappresenta uno stato del sistema per il quale la misura di  $B$  dà con certezza il risultato  $\beta$ . Ma anche il vettore  $P|\beta\rangle$ , dove  $P = P(p)$  è un qualsiasi operatore di permutazione, deve avere la stessa proprietà a causa del principio di indistinguibilità. Deve cioè aversi

$$(3.2) \quad BP|\beta\rangle = \beta P|\beta\rangle = PB|\beta\rangle$$

ovvero  $[P, B]|\beta\rangle = 0$ . E poiché questa deve valere per qualunque  $|\beta\rangle$ , ne segue<sup>1</sup>

$$(3.3) \quad [P, B] = 0, \quad \text{ovvero} \quad PB P^{-1} = B.$$

Quest'ultima equazione, secondo la (2.4), dice che ogni osservabile  $B$  deve essere invariante per una qualunque permutazione delle variabili delle particelle, ovvero deve essere *simmetrica* in queste variabili. Questa proprietà sarà presa come parte della definizione di osservabile: fra tutti gli operatori autoaggiunti che possiamo costruire come funzioni delle variabili  $q^{(i)}, p^{(i)}$  delle singole particelle, chiameremo *osservabili* solo quelli che sono invarianti per permutazioni delle particelle.

Osserviamo che partendo da un operatore non simmetrico  $B_{ns}$  possiamo ottenerne uno simmetrico  $B_s$  nel modo seguente

$$(3.4) \quad B_s = \lambda \sum_p P(p) B_{ns} P^{-1}(p),$$

dove  $\lambda$  è una costante reale da scegliere caso per caso. Questa tecnica di simmetrizzazione risulta utile in particolare quando  $B_{ns}$  dipende da meno di  $N$  particelle.

Discutiamo ora il caso dei vettori di stato. In meccanica quantistica uno stato puro è determinato da un'osservazione massima del sistema ed è rappresentato da un raggio dello spazio di Hilbert. Il sistema di  $N$  particelle identiche di cui ci stiamo occupando presenta però un problema.

Sia  $B \equiv (B_1, \dots, B_n)$  un'osservazione massima e  $\beta \equiv (\beta_1, \dots, \beta_n)$  un insieme di autovalori corrispondenti. Secondo il postulato richiamato sopra, a questa osservazione deve corrispondere uno stato puro rappresentato da un vettore  $|\beta\rangle$ , definito a meno di un fattore di fase. D'altra parte tutte le osservabili  $B_i$  sono invarianti per permutazioni, quindi se  $|\beta\rangle$  è un autovettore anche  $|\beta, p\rangle = P(p)|\beta\rangle$  è autovettore. Se accadesse —come è in linea di principio possibile— che i vettori  $|\beta, p\rangle$ , per diverse permutazioni  $p$ , fossero linearmente indipendenti, si avrebbe che al risultato  $\beta$  della nostra osservazione massima corrisponderebbe un autospazio avente non una, ma  $N!$  dimensioni. L'indice  $p$  funzionerebbe in questo caso come un indice di degenerazione e si avrebbe quella che viene chiamata *degenerazione di scambio*. Nessuna osservazione fisica potrebbe infatti distinguere gli stati  $|\beta, p\rangle$  di questo autospazio gli uni dagli altri.

---

<sup>1</sup> La dimostrazione non è rigorosa poiché, come vedremo alla fine del paragrafo, gli stati fisici  $|\beta\rangle$  non occupano tutto lo spazio  $\mathcal{H}_N$ , ma solo un sottospazio. La proprietà espressa dalla (3.3) dovrà quindi essere postulata.

Questo fatto creerebbe un grave problema di principio: da un lato un'osservazione massima non sarebbe più sufficiente a determinare il vettore di stato a un dato istante, mentre dall'altro le probabilità dei risultati delle misure dipendono dal vettore di stato e non sarebbero quindi più calcolabili<sup>2</sup>. Si avrebbe quindi una perdita della capacità predittiva della meccanica quantistica. L'esperienza mostra invece che per i sistemi di particelle identiche non c'è degenerazione di scambio, ma che a un'osservazione massima corrisponde uno stato puro rappresentato da un vettore ket. Questa affermazione, che estende ai sistemi di particelle identiche il postulato generale sugli stati, richiede però un postulato a parte, poiché non può essere dedotta in modo rigoroso dai postulati generali.

Partendo da questo principio, possiamo vedere facilmente che i vettori di stato devono avere delle particolari proprietà di simmetria. Infatti se  $|\psi\rangle$  rappresenta uno stato puro del sistema, il vettore  $P(p)|\psi\rangle$ , ottenuto con una permutazione  $p$  delle particelle, rappresenta lo stesso stato fisico, e potrà quindi differire da  $|\psi\rangle$  solo per un fattore di fase:

$$(3.5) \quad P(p)|\psi\rangle = \epsilon_p |\psi\rangle$$

dove per la (2.6)  $|\epsilon_p| = 1$ .

In particolare per lo scambio fra le particelle  $i$  e  $j$  si ha

$$(3.6) \quad P_{ij}|\psi\rangle = \epsilon_{ij} |\psi\rangle$$

dove dalla (2.8) segue  $\epsilon_{ij} = \pm 1$ . È facile vedere che le parità di scambio  $\epsilon_{ij}$  delle coppie di particelle sono tutte uguali fra loro. Infatti dalla relazione

$$(3.7) \quad P_{ij} = (P_{1i}P_{2j})P_{12}(P_{1i}P_{2j}),$$

che si verifica facilmente, e dalla (3.6) segue

$$(3.8) \quad \epsilon_{ij} = \epsilon_{12} = \epsilon = \pm 1.$$

Si ottiene quindi l'importante risultato che gli stati fisici del sistema possono essere o simmetrici o antisimmetrici per lo scambio di una qualunque coppia di particelle. E poiché la parità di scambio non dipende dalla coppia, si capisce facilmente che non può dipendere né dagli stati quantici occupati, né dall'interazione relativa, né dal numero  $N$  delle particelle, né dallo stato  $|\psi\rangle$  del sistema. Essa può quindi dipendere solo dal tipo di particelle e si può dimostrare (nella teoria quantistica dei campi) che  $\epsilon$  dipende unicamente dallo spin. Si hanno precisamente i seguenti due casi:

$$(3.9) \quad \begin{cases} \text{spin intero:} & \epsilon = +1, \quad \text{bosoni} \\ \text{spin semi-intero:} & \epsilon = -1, \quad \text{fermioni} \end{cases}$$

---

<sup>2</sup> Consideriamo come esempio il caso di due particelle non interagenti, che occupano gli stati quantici distinti  $q_1$  e  $q_2$ . Il vettore di stato è dato dalla combinazione  $|\psi\rangle = \alpha|q_1, q_2\rangle + \beta|q_2, q_1\rangle$ , dove  $\alpha$  e  $\beta$  obbediscono alla condizione  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , ma sono per il resto arbitrari. Se facciamo la misura di una osservabile  $F$ , la probabilità di ottenere un valore  $f$  è data da  $w(f) = \langle \psi | Q_f | \psi \rangle$ , dove  $Q_f$  è il proiettore sull'autospazio di  $f$ . Poiché  $Q_f$  è simmetrico per lo scambio di 1 con 2, si ottiene  $w(f) = \langle q_1, q_2 | Q_f | q_1, q_2 \rangle + 2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta) \langle q_1, q_2 | Q_f | q_2, q_1 \rangle$ . Se  $F$  non è diagonale in questa base, neanche  $Q_f$  lo è e sarà quindi  $\langle q_1, q_2 | Q_f | q_2, q_1 \rangle \neq 0$ . Ne segue che  $w(f)$  rimane indeterminato.

dove la denominazione di *bosoni* e *fermioni* deriva dalla statistica a cui obbediscono le due classi di particelle.

In definitiva gli stati fisici di un sistema di particelle identiche possono essere solo dei due tipi seguenti:

$$(3.10) \quad \begin{cases} |\psi_b\rangle = \lambda S|\psi\rangle, & \text{bosoni} \\ |\psi_f\rangle = \lambda A|\psi\rangle, & \text{fermioni} \end{cases}$$

dove  $\lambda$  è una costante di normalizzazione e il vettore  $|\psi\rangle = |\psi(1, 2, \dots, N)\rangle$  può anche non avere una simmetria definita.

I risultati esposti in questo paragrafo sono espressi dal seguente postulato, detto *postulato di simmetrizzazione*:

**Postulato.** *Le osservabili di un sistema di  $N$  particelle identiche sono rappresentate da operatori autoaggiunti invarianti per qualunque permutazione delle particelle. Gli stati puri del sistema sono rappresentati da vettori dello spazio di Hilbert che sono simmetrici (bosoni) o antisimmetrici (fermioni) per lo scambio di una qualunque coppia di particelle.*

Da questo postulato si ricavano in particolare le seguenti importanti conseguenze.

1. *La parità di scambio degli stati si mantiene nel tempo.*

Si ha infatti:  $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$ , dove l'operatore di evoluzione  $U$  è funzione (o più in generale un funzionale) della hamiltoniana  $H$ . Ma  $H$  è una osservabile e pertanto commuta con qualunque  $P$ . Allora anche  $U$  commuta in particolare con  $P_{ij}$  e quindi, applicando  $P_{ij}$  alla precedente equazione, si ottiene il risultato voluto.

2. *Lo spazio di Hilbert degli stati fisici è ristretto a  $\mathcal{H}_{Nb} = S\mathcal{H}_N$  per i bosoni e a  $\mathcal{H}_{Nf} = A\mathcal{H}_N$  per i fermioni, dove  $S$  e  $A$  sono i proiettori dati dalle (2.9) e (2.10).*

Infatti se  $|\psi\rangle$  è un arbitrario vettore di  $\mathcal{H}_N$ , dalle (2.12) seguono le relazioni

$$(3.11) \quad \begin{aligned} P_{ij} S|\psi\rangle = S|\psi\rangle &\Rightarrow S|\psi\rangle = |\psi_b\rangle \in \mathcal{H}_{Nb} \Rightarrow S\mathcal{H}_N \subseteq \mathcal{H}_{Nb} \\ P_{ij} A|\psi\rangle = -A|\psi\rangle &\Rightarrow A|\psi\rangle = |\psi_f\rangle \in \mathcal{H}_{Nf} \Rightarrow A\mathcal{H}_N \subseteq \mathcal{H}_{Nf} \end{aligned}$$

D'altra parte se  $|\psi_b\rangle \in \mathcal{H}_{Nb} \subset \mathcal{H}_N$  è un qualsiasi stato bosonico e  $|\psi_f\rangle \in \mathcal{H}_{Nf} \subset \mathcal{H}_N$  è un qualsiasi stato fermionico si ha

$$(3.12) \quad \begin{aligned} S|\psi_b\rangle = |\psi_b\rangle &\Rightarrow S\mathcal{H}_N \supseteq \mathcal{H}_{Nb} \\ A|\psi_f\rangle = |\psi_f\rangle &\Rightarrow A\mathcal{H}_N \supseteq \mathcal{H}_{Nf} \end{aligned}$$

Il confronto delle precedenti disuguaglianze dimostra la proprietà enunciata.

## 4. Funzioni d'onda di particelle non interagenti. Principio di esclusione

Consideriamo un sistema di  $N$  particelle in un campo esterno e non interagenti fra loro. Se le particelle fossero distinguibili, la funzione d'onda del sistema sarebbe il prodotto delle

funzioni d'onda delle singole particelle, mentre nel caso di particelle identiche questo prodotto deve essere simmetrizzato secondo la (3.10). Questo corrisponde al fatto che lo stato fisico del sistema deve essere una sovrapposizione con uguale ampiezza di tutti gli stati in cui le particelle occupano i vari stati singoli in tutte le permutazioni possibili, come è richiesto dal principio di indistinguibilità.

Siano  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  gli stati quantici, non necessariamente distinti, occupati dalle particelle e sia  $\psi_{\alpha_k}(i) \equiv \psi_{\alpha_k}(\mathbf{x}^{(i)}, s_z^{(i)}, \dots)$  la funzione d'onda normalizzata della particella  $i$  nello stato  $\alpha_k$ . Per un sistema di bosoni la funzione d'onda complessiva è data dalla combinazione simmetrica

$$(4.1) \quad \Psi(1, 2, \dots, N) = \lambda S \psi_{\alpha_1}(1) \psi_{\alpha_2}(2) \dots \psi_{\alpha_N}(N).$$

dove  $S$  è il simmetrizzatore (2.9). Per calcolare la costante  $\lambda$  supponiamo che le particelle occupino  $m \leq N$  stati quantici distinti e ce ne siano  $n_1$  nel primo stato,  $n_2$  nel secondo,  $\dots$ ,  $n_m$  nell' $m$ -esimo. Una permutazione delle  $n_i$  particelle che occupano lo stesso stato lascia inalterato il prodotto delle  $\psi_{\alpha_i}$  e quindi il prodotto scalare fra il prodotto di partenza e quello permutato risulta uguale a 1. Invece una permutazione che scambia le particelle fra stati diversi cambia il prodotto delle  $\psi_{\alpha_i}$  in una funzione ad esso ortogonale. Usando la proprietà  $S^2 = S$  ed esplicitando  $S$  si ottiene allora

$$(4.2) \quad \begin{aligned} 1 = \|\Psi\|^2 &= |\lambda|^2 \frac{1}{N!} \sum_p \left( \prod_{i=1}^N \psi_{\alpha_i}(i), P(p) \prod_{i=1}^N \psi_{\alpha_i}(i) \right) \\ &= |\lambda|^2 \frac{n_1! n_2! \dots n_m!}{N!}. \end{aligned}$$

Risulta pertanto, a meno di un fattore di fase:

$$(4.3) \quad \lambda = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_m!}}.$$

Per un sistema di fermioni la funzione d'onda è data dalla combinazione antisimmetrica

$$(4.4) \quad \Psi(1, 2, \dots, N) = \lambda A \prod_{i=1}^N \psi_{\alpha_i}(i).$$

Si vede subito che gli stati  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  devono essere tutti distinti, altrimenti la  $\Psi$  è identicamente nulla. In altre parole ogni stato quantico può essere occupato al più da un solo fermione. Questo corrisponde al *principio di esclusione*, enunciato da Pauli nel 1925 per spiegare il sistema periodico degli elementi.

La costante  $\lambda$  nella (4.4) è data ancora dalla (4.3), dove ora però  $n_i = 1$ , per cui risulta  $\lambda = \sqrt{N!}$ . Si può osservare che la (4.4) ha la forma del determinante della matrice che ha per elementi  $\psi_{\alpha_i}(j)$  e dove gli indici  $i$  e  $j$  numerano, per esempio, le righe e le colonne. La  $\Psi$  si può allora scrivere nel modo seguente, noto come *determinante di Slater*:

$$(4.5) \quad \Psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(1) & \psi_{\alpha_1}(2) & \dots & \psi_{\alpha_1}(N) \\ \psi_{\alpha_2}(1) & \psi_{\alpha_2}(2) & \dots & \psi_{\alpha_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(1) & \psi_{\alpha_N}(2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(N) \end{pmatrix}.$$

In questa espressione il principio di esclusione traspare dal fatto che, se due stati quantici sono uguali, la matrice ha due righe uguali e quindi il determinante è nullo.

## 5. Effetti di scambio

Vogliamo discutere brevemente due effetti fisici che seguono direttamente dal postulato di simmetrizzazione delle funzioni d'onda. Consideriamo il caso di due particelle identiche dotate di spin e interagenti con l'esterno e fra loro tramite potenziali indipendenti dallo spin. La funzione d'onda del sistema si può allora scrivere come il prodotto di una funzione delle coordinate per una funzione dello spin:

$$(5.1) \quad \Psi(1, 2) = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \chi(\mu_1, \mu_2).$$

L'equazione di Schrödinger determina soltanto la funzione  $\phi$ , mentre la  $\chi$  rimane arbitraria. Tuttavia la simmetria di scambio della  $\Psi(1, 2)$  stabilisce una relazione fra le funzioni  $\phi$  e  $\chi$  e quindi una dipendenza della funzione delle coordinate  $\phi$  dallo stato di spin delle particelle.

Prendiamo come esempio un sistema isolato di due elettroni, soggetti solo alla reciproca interazione coulombiana. Nel sistema del centro di massa,  $\phi$  dipende solo dalle coordinate relative  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$  e sarà in particolare della forma  $\phi(\mathbf{x}) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$ . Lo scambio dei due elettroni cambia  $\mathbf{x}$  in  $-\mathbf{x}$ . Allora, dalla condizione  $\Psi(2, 1) = -\Psi(1, 2)$ , segue che se  $\chi$  è uno stato di singoletto ( $S = 0$ ), ed è quindi antisimmetrico nello scambio delle variabili di spin,  $\phi(\mathbf{x})$  deve essere una funzione pari di  $\mathbf{x}$ , e quindi  $l$  deve essere pari. Invece se  $\chi$  è uno stato di tripletto ( $S = 1$ ), ed è quindi simmetrico nelle variabili di spin,  $\phi(\mathbf{x})$  deve essere una funzione dispari, e quindi  $l$  deve essere dispari.

Si vede allora che, nonostante che la hamiltoniana non dipenda dallo spin, le autofunzioni  $\phi(\mathbf{x})$  vengono a dipendere dallo spin totale degli elettroni. Si può dunque parlare di un'interazione che è in qualche modo analoga all'interazione spin-orbita, ma che è solo una conseguenza dell'identità delle particelle. Tale interazione si chiama *interazione di scambio*.

Supponiamo ora che le due particelle considerate prima siano ancora soggette a un potenziale esterno indipendente dallo spin, ma che la loro interazione mutua sia trascurabile. La funzione  $\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  della (5.1) sarà allora esprimibile con i prodotti delle funzioni d'onda  $u(\mathbf{x})$  e  $v(\mathbf{x})$  —che supporremo ortogonali— delle due particelle nel modo seguente:

$$(5.2) \quad \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u(\mathbf{x}_1) v(\mathbf{x}_2) + \epsilon u(\mathbf{x}_2) v(\mathbf{x}_1)],$$

dove  $\epsilon = +1$  per una funzione simmetrica e  $\epsilon = -1$  per una funzione antisimmetrica. Per quanto visto prima, i due casi possono verificarsi entrambi, sia per i bosoni che per i fermioni, a seconda della parità di scambio della funzione degli spin  $\chi(\mu_1, \mu_2)$ .

Per fare un caso concreto, consideriamo ancora il caso dei due elettroni, per cui avremo  $\epsilon = +1$  per lo stato di singoletto e  $\epsilon = -1$  per gli stati di tripletto. Indicando con  $w(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) d^3x_1 d^3x_2$  la probabilità di trovare un elettrone nell'elemento di volume  $d^3x_1$  e l'altro elettrone nell'elemento di volume  $d^3x_2$ , si ha

$$(5.3) \quad w(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = |\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 = \frac{1}{2} |u(\mathbf{x}_1)|^2 |v(\mathbf{x}_2)|^2 + \frac{1}{2} |u(\mathbf{x}_2)|^2 |v(\mathbf{x}_1)|^2 + \epsilon \operatorname{Re} [\bar{u}(\mathbf{x}_1) v(\mathbf{x}_1) \bar{v}(\mathbf{x}_2) u(\mathbf{x}_2)].$$

I primi due termini di questa espressione hanno una semplice interpretazione in termini di particelle distinguibili. Il primo termine rappresenta la densità di probabilità che un elettrone si



trovi in un intorno di  $\mathbf{x}_1$  nello stato corrispondente alla funzione  $u$  e l'altro si trovi in un intorno di  $\mathbf{x}_2$  nello stato corrispondente a  $v$ , il tutto con probabilità integrata uguale a  $\frac{1}{2}$ . Il secondo termine è analogo al primo, con i due elettroni scambiati. Il terzo termine invece è un termine di interferenza, che sarebbe assente se i due elettroni fossero distinguibili e che nasce proprio dalla simmetrizzazione della  $\phi$  richiesta dall'indistinguibilità. Esso prende il nome di *densità di scambio*.

Vediamo alcune caratteristiche di quest'ultimo termine. Poiché l'integrale su  $\mathbf{x}_1$  e/o su  $\mathbf{x}_2$  è nullo, esso sarà positivo in certe regioni e negativo in altre e localmente può avere effetti importanti. Se ad esempio prendiamo  $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 = \mathbf{x}$ , la (5.3) diventa

$$(5.4) \quad w(\mathbf{x}) = (1 + \epsilon) |u(\mathbf{x})|^2 |v(\mathbf{x})|^2.$$

Vediamo quindi in primo luogo che il termine di scambio dà lo stesso contributo degli altri due termini. Inoltre se  $\epsilon = -1$  (stato di tripletto) si ha  $w(\mathbf{x}) = 0$ , cioè la probabilità di trovare gli elettroni nello stesso punto si annulla. In altre parole la densità di scambio è negativa e grande quando gli elettroni sono vicini, e al contrario sarà positiva quando gli elettroni sono più lontani. L'effetto del termine di scambio è quindi quello di simulare una repulsione fra gli elettroni, rispetto al caso di particelle distinguibili. Viceversa se  $\epsilon = +1$  (stato di singoletto) la densità di scambio è positiva e grande quando gli elettroni sono vicini, mentre sarà negativa quando sono lontani. L'effetto corrisponde in questo caso a un'attrazione, rispetto al caso di particelle diverse.

L'effetto dell'identità delle particelle sarà tanto più importante quanto più è grande la densità di scambio e viceversa sarà trascurabile se questa densità è sempre piccola. In particolare si vede dalla (5.3) che se le funzioni d'onda  $u(\mathbf{x})$  e  $v(\mathbf{x})$  dei due elettroni hanno supporti disgiunti (cioè sono diverse da zero in regioni distinte dello spazio), la densità di scambio è sempre nulla, e quindi in questo caso non è necessario antisimmetrizzare la funzione d'onda.