

Indice

11 Sistemi a molte particelle.	3
11.1 Introduzione.	3
11.2 Postulato di simmetrizzazione.	5
11.2.1 Equazione di Schrödinger.	8
11.3 Discussione generale.	9
11.3.1 Simmetrizzazione e Antisimmetrizzazione.	13
11.3.2 Simmetrizzazione e fattorizzazione.	14
11.4 Costruzione degli stati.	16
11.4.1 Normalizzazione degli stati.	17
11.4.2 Misure e proiettori.	18
11.4.3 Determinanti di Slater.	19
11.5 Interferenza quantistica.	20
11.5.1 Particelle indistinguibili: bosoni.	22
11.5.2 Particelle indistinguibili: fermioni.	24
11.6 Discussione sull'interferenza.	27
11.7 Simmetrie orbitali e di spin.	30
11.7.1 Spinori simmetrici.	32
11.7.2 Simmetrie di spin: $\chi(\sigma)$.	33
11.7.3 Simmetrie orbitali: $\varphi(\mathbf{x})$.	34
11.8 Elementi di matrice.	34
11.8.1 Relazione di completezza.	37
11.8.2 Operatori.	38
11.9 Rappresentazione di Fock.	40
11.9.1 Bosoni.	40
11.9.2 Fermioni.	44
11.9.3 Operatori in rappresentazione di Fock.	44
11.10 Una discussione sul significato fisico.	45
11.10.1 Esempio.	45
11.10.2 Gruppo $SU(2)$.	47
11.10.3 Simmetria discreta.	48
11.10.4 Rappresentazione di Fock.	48
11.10.5 Lo spin.	49
11.10.6 Aspetto geometrico.	50
11.10.7 Stati composti.	50
Complementi	51
11.A Appendice.	51
11.B Elementi di matrice per stati ad N particelle.	54
11.B.1 Bosoni.	54
11.B.2 Fermioni.	61

Capitolo 11

Sistemi a molte particelle.

11.1 Introduzione.

In Natura spesso compaiono sistemi composti da particelle identiche, basti pensare agli elettroni in un atomo o in un metallo, ai fotoni in un fascio di luce, o a sistemi analoghi. La trattazione quantistica di queste situazioni presenta alcune importanti peculiarità che cercheremo di mettere in luce.

Cominciamo dal caso più semplice: due particelle senza spin. Per una singola particella gli stati del sistema sono definiti da vettori¹ in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , in particolare in rappresentazione di Schrödinger da funzioni $\psi(\mathbf{x}) \in L^2$. Ci si aspetterebbe di poter definire gli stati di due particelle come funzioni del tipo $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, funzioni di due variabili vettoriali, corrispondenti alle due variabili posizione classiche $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ delle due particelle. In termini astratti questo significa dire che lo spazio di Hilbert del sistema composto è $\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, il che in pratica significa che una base per lo spazio $\mathcal{H}^{(2)}$ è data da $e_i \otimes f_j$ dove e_i, f_j sono vettori di base negli spazi di Hilbert di singola particella.

Per la rappresentazione di Schrödinger questo è abbastanza intuitivo: a \mathbf{x} fisso sviluppiamo la funzione d'onda nella base $f_j(\mathbf{y})$, i coefficienti dipenderanno da \mathbf{x} , sviluppiamo ora i coefficienti nella base $e_i(\mathbf{x})$ ed avremo l'affermazione appena fatta:

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_j c_j(\mathbf{x}) f_j(\mathbf{y}) = \sum_{i,j} A_{ij} e_i(\mathbf{x}) f_j(\mathbf{y})$$

In particolare se lo spazio di Hilbert è finito dimensionale, di dimensione n diciamo, lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}^{(2)}$ ha dimensione n^2 . È assolutamente essenziale che il lettore abbia ben chiara la differenza fra somma di spazi di Hilbert e prodotto: nel caso finito dimensionale il primo ha dimensione $2n$, il secondo n^2 .

Esercizio. Si considerino due particelle di spin 1, tralasciando la dipendenza orbitale delle funzioni d'onda e si supponga che l'Hamiltoniana sia $H = \mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2$, si scrivano gli autostati di H e ci si convinca che sono 9.

In generale per N particelle lo spazio degli stati sarà

$$\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N \quad (11.1)$$

Torniamo ora al caso di due particelle e supponiamo di considerare uno stato particolarmente semplice, fattorizzato, del tipo

$$\Psi_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a(\mathbf{x})b(\mathbf{y}) \quad (11.2)$$

¹Propriamente bisognerebbe parlare di raggi, cioè dei vettori non nulli modulo un fattore di fase. In questo discorso iniziale la precisazione è ininfluente.

Se le due particelle sono identiche questo significa che lo stesso stato dinamico, cioè la stessa situazione fisica descritta dallo stato Ψ_0 , deve essere descritta dalla funzione in cui il ruolo delle due particelle viene scambiato,

$$\Psi_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a(\mathbf{y})b(\mathbf{x})$$

Il principio di sovrapposizione allora implica che la stessa situazione fisica deve essere descritta da una **qualunque** combinazione lineare

$$c_1\Psi_0 + c_2\Psi_1 \quad (11.3)$$

Usando le combinazioni lineari

$$\psi_S(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} [a(\mathbf{x})b(\mathbf{y}) + a(\mathbf{y})b(\mathbf{x})], \quad \psi_A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} [a(\mathbf{x})b(\mathbf{y}) - a(\mathbf{y})b(\mathbf{x})] \quad (11.4)$$

lo stato del sistema è scrivibile nella forma

$$\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \alpha\psi_S(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \beta\psi_A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (11.5)$$

Le due combinazioni ψ_S, ψ_A sono ortogonali, come è immediato verificare, quindi normalizzando le funzioni:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (11.6)$$

Consideriamo ora l'evoluzione temporale dello stato: se l'Hamiltoniana è simmetrica, e questo è obbligatorio altrimenti le due particelle avrebbero interazioni diverse e non sarebbero identiche, le combinazioni ψ_S e ψ_A conservano la loro simmetria nell'evoluzione. Ad esempio dopo un tempo Δt l'evoluzione temporale della parte simmetrica è ancora simmetrica:

$$\psi_S(t + \Delta t) = \psi_S(t) - iH\Delta t\psi_S(t) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

Ognuno dei due termini nella (11.5) evolve indipendentemente e lo stato continuerà ad essere scritto nella stessa forma nel corso dell'evoluzione.

Proviamo ora a calcolare la probabilità di trovare una particella in \mathbf{r}_1 ed un'altra in \mathbf{r}_2 , questa sarà data da

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{y}\Phi^*(\mathbf{x}, \mathbf{y})[\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{y} - \mathbf{r}_2) + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_2)\delta(\mathbf{y} - \mathbf{r}_1)]\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ &= 2(|\alpha|^2|\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 + |\beta|^2|\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2) \end{aligned} \quad (11.7)$$

Nella densità di probabilità della (11.7) compaiono due addendi perchè essendo le particelle indistinguibili la situazione "una particella in \mathbf{r}_1 e l'altra in \mathbf{r}_2 " è realizzata in due modi.

Il risultato (11.7) è molto "preoccupante" per svariati motivi.

- Innanzitutto la forma non dipende dalla particolare osservabile considerata, per qualunque funzione $f(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ simmetrica fra le due particelle si ha

$$\langle \Phi | f | \Phi \rangle = |\alpha|^2 \langle \psi_S | f | \psi_S \rangle + |\beta|^2 \langle \psi_A | f | \psi_A \rangle \quad (11.8)$$

- Il risultato della misura *dipende* da α, β , per l'esattezza dai loro moduli. Quindi la misura dipende da quale combinazione (11.3) viene selezionata, fra le infinite possibili: questo pone un problema perchè se fosse vero i vari stati di partenza non potrebbero essere equivalenti, dando luogo a misure diverse, mentre se sono equivalenti il risultato della misura non è predicibile.
- Dalla (11.8) è evidente che il risultato non solo non dipende dalla fase complessiva dello stato, come sempre nel caso di raggi dello spazio di Hilbert, ma nemmeno dalla **fase relativa** fra i coefficienti α, β . Questo significa che non c'è interferenza fra i due termini e quindi il risultato (11.8) è equivalente a quello ottenuto non da una misura su uno stato puro ma da una misura su una miscela statistica con matrice densità

$$\rho = |\alpha|^2 |\psi_S\rangle \langle \psi_S| + |\beta|^2 |\psi_A\rangle \langle \psi_A|$$

11.2 Postulato di simmetrizzazione.

In Meccanica Quantistica i problemi elencati nell'introduzione, che come vedremo sono anche più complicati nel caso di un numero maggiore di particelle, vengono superati dall'introduzione di un *postulato* aggiuntivo il *Postulato di Simmetrizzazione*.

P1: *In natura gli stati ad N particelle sono stati a simmetria definita: o totalmente simmetrici o totalmente antisimmetrici.*

Quale delle due possibilità si realizza è fissata da un secondo postulato:

P2: *Per particelle di spin intero (bosoni) gli stati sono simmetrici, per particelle di spin semiintero (fermioni) gli stati sono antisimmetrici.*

I postulati sono espressi nell'ambito della meccanica quantistica non relativistica usuale, alcune specifiche saranno chiarite in seguito. In particolare notiamo che nell'ambito della meccanica quantistica relativistica un profondo risultato, dovuto a Pauli[13], afferma che il secondo postulato, sotto ampie ipotesi, è un teorema, il cosiddetto *Teorema di Spin e Statistica*.

Come per tutti i postulati ci sono alcuni problemi da affrontare:

- Questi postulati sono coerenti con il resto della teoria?
- La meccanica quantistica costruita con questi postulati aggiuntivi dà uno schema che si adatta ai fatti sperimentali? La risposta è sì. Le conferme sono innumerevoli e vanno dalla verifica delle statistiche di Bose-Einstein e Fermi-Dirac alla spiegazione della struttura atomica, dalla costituzione dei nuclei alla fisica dei quarks, etc.
- Cosa cambierebbe nella Meccanica Quantistica di N particelle in assenza di questi postulati? O meglio ancora ci possono essere delle descrizioni coerenti della meccanica quantistica di N particelle con postulati diversi?

Il motivo per cui presentiamo una discussione di questa problematica un pò più dettagliata di quanto fatto normalmente in molti libri di testo è in parte dovuto al fiorire in questi anni di molte ricerche sull'argomento, soprattutto in ambito di fisica della materia e fisica delle particelle elementari. Per molta parte della presentazione seguiremo la traccia fornita dai lavori [9, 10]. In questo paragrafo presenteremo gli aspetti essenziali del processo di simmetrizzazione, nel prossimo discuteremo il problema in termini più generali. La lettura del prossimo paragrafo non è necessaria per la comprensione del resto del testo.

Supponiamo per concretezza di avere un sistema di fermioni, il caso bosonico è simile. Lo stato del sistema, come detto è un vettore in $\mathcal{H}^{(N)}$. Per particelle con spin lo spazio di singola particella, \mathcal{H} comprende sia le variabili orbitali che quelle di spin. Indichiamo l'insieme di queste variabili con λ . Una base per $\mathcal{H}^{(N)}$ è costituita da vettori del tipo $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle$.

L'insieme delle permutazioni di N oggetti forma un gruppo, il gruppo simmetrico S_N di ordine $N!$, cioè ci sono $N!$ elementi.

Ogni permutazione si può ottenere come prodotto di scambi $i \leftrightarrow j$ di due particelle, questo scambio agisce in modo naturale sui vettori di base:

$$P_{ij}|\lambda_1, \dots, \lambda_i \dots \lambda_j \dots \lambda_N\rangle = |\lambda_1, \dots, \lambda_j \dots \lambda_i \dots \lambda_N\rangle \quad (11.9)$$

Poichè P_{ij} manda un vettore di base in un altro vettore di base è un operatore unitario in $\mathcal{H}^{(N)}$, e poichè ogni permutazione P è un prodotto di scambi, P è un operatore unitario. Ad ogni permutazione si può associare una parità, a seconda che coinvolga un numero pari o dispari di scambi, indicheremo con ϵ_P tale parità, $\epsilon_P = 1$ per permutazioni pari, $\epsilon_P = -1$ per permutazioni dispari. Per due permutazioni evidentemente

$$\epsilon_{PQ} = \epsilon_P \epsilon_Q$$

Definiamo gli operatori di simmetrizzazione ed antisimmetrizzazione:

$$S = \frac{1}{N!} \sum_P P \quad A = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon_P P \quad (11.10)$$

È facile vedere che questi operatori sono dei proiettori.

Ad esempio per A

$$A^2 = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon_P P \frac{1}{N!} \sum_Q \epsilon_Q Q = \frac{1}{N!^2} \sum_{P,Q} \epsilon_{PQ} PQ$$

possiamo cambiare variabili e porre $X = PQ$, a fisso P al variare di Q X percorre tutto il gruppo senza ripetizioni e quindi, la somma precedente dipende solo da X , ricordando che ci sono $N!$ permutazioni:

$$A^2 = \frac{1}{N!^2} \sum_{P,X} \epsilon_X X = \frac{1}{N!} \sum_X \epsilon_X X = A \quad (11.11)$$

Allo stesso modo usando il fatto che P è unitario, segue $P^\dagger = P^{-1}$, l'operazione $P \rightarrow P^{-1}$ è biunivoca in un gruppo, e, poichè per l'identità $\delta_1 = 0$ si ha $\delta_{P^{-1}} = \delta_P$ quindi effettuando il cambiamento di variabili $Q = P^{-1}$:

$$A^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon_P P^{-1} = \frac{1}{N!} \sum_Q \epsilon_Q Q = A \quad (11.12)$$

Le equazioni (11.11),(11.12) assicurano che A è un proiettore. la dimostrazione per S è identica.

Le basi per gli stati simmetrici ed antisimmetrici sono definite da

$$S|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \quad A|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \quad (11.13)$$

L'azione dei proiettori è piuttosto drastica: degli $N!$ stati con numeri quantici $\lambda_1 \dots \lambda_N$ ne viene selezionato solo 1, quello simmetrico o antisimmetrico rispettivamente.

Ritourneremo più avanti su esempi espliciti e su una riscrittura più intuitiva degli stati, ora occupiamoci della questione della consistenza della procedura.

Cominciamo con l'osservare che questa scelta risolve il problema indicato nell'introduzione: se lo stato è simmetrico $\beta = 0$ se è antisimmetrico, $\alpha = 0$, in ogni caso abbiamo a che fare con usuali raggi di uno spazio di Hilbert.

Il primo punto per la consistenza è connesso all'evoluzione temporale, ma è semplice vedere che non ci sono problemi. Se l'Hamiltoniana è simmetrica automaticamente l'evoluzione temporale preserva la simmetria dello stato, formalmente se H è simmetrica significa che $[H, P] = 0$ per ogni P , in particolare commuta con S e A , lo stesso vale per l'operatore di evoluzione temporale, quindi, ad esempio

$$\psi_A(t) = U(t)|\psi_A(0)\rangle = U(t)A|\psi_A(0)\rangle = AU(t)|\psi_A(0)\rangle$$

cioè $|\psi_A(t)\rangle$ è ancora uno stato antisimmetrico.

L'altro punto delicato è il seguente: di solito "tagliando" una fetta dello spazio di Hilbert perdiamo l'unitarietà della teoria, il motivo è il seguente. Se $|n\rangle$ è un insieme completo di stati la completezza assicura che

$$P_n = |\langle n|\psi_A(t)\rangle|^2 \quad \sum_n P_n = 1$$

Se ci limitiamo a stati a simmetria definita, ad esempio antisimmetrici, come facciamo ad assicurare la completezza? Questa è vera solo se **tutti** gli elementi di matrice $\langle n_P|\psi_A(t)\rangle$ sono nulli per $P \neq A$, cioè se sono assolutamente vietate le transizioni fra stati antisimmetrici e stati con simmetria diversa.

È facile vedere che ad esempio per 2 particelle questo è vero: il prodotto scalare fra uno stato simmetrico ed uno antisimmetrico (le due uniche possibilità in questo caso) è nullo:

$$\begin{aligned} & (\langle \lambda_1, \lambda_2 | + \langle \lambda_2, \lambda_1 |) (| \alpha_1, \alpha_2 \rangle - | \alpha_2, \alpha_1 \rangle) = \\ & \langle \lambda_1 | \alpha_1 \rangle \langle \lambda_2 | \alpha_2 \rangle - \langle \lambda_1 | \alpha_2 \rangle \langle \lambda_2 | \alpha_1 \rangle + \langle \lambda_2 | \alpha_1 \rangle \langle \lambda_1 | \alpha_2 \rangle - \langle \lambda_2 | \alpha_2 \rangle \langle \lambda_1 | \alpha_1 \rangle = 0 \end{aligned} \quad (11.14)$$

Per N particelle notiamo che S ed A sono proiettori ortogonali fra loro, perchè, ad esempio, la simmetrizzazione di uno stato antisimmetrico dà chiaramente zero, quindi, in generale

$$\langle \psi_S | \psi_A \rangle = \langle \psi_S | SA | \psi_A \rangle = 0$$

La dimostrazione generale dell'uguaglianza

$$\langle n | \psi_A \rangle = 0 \quad \text{se } |n\rangle \text{ non è antisimmetrico} \quad (11.15)$$

richiede un minimo di teoria dei gruppi, il lemma di Schür, e la rimandiamo al prossimo paragrafo.

Lo stesso discorso vale per gli stati simmetrici. In conclusione tutte le probabilità di transizione verso stati a simmetria diversa sono nulle, quindi l'unitarietà viene preservata anche limitandosi ai soli sottospazi a simmetria definita.

Quanto visto finora ci assicura che almeno dal punto di vista matematico la restrizione ai sottospazi a simmetria definita è consistente. C'è però un problema di consistenza fisica da analizzare: l'introduzione del procedimento di (anti)simmetrizzazione induce necessariamente una correlazione fra gli stati, ma si presume che la fisica fatta in una regione limitata dello spazio non dipenda, ad esempio, dall'esistenza o meno di un elettrone su Plutone anche se in linea di principio per definire uno stato puro di elettrone sulla Terra si dovrebbe operare l'antisimmetrizzazione con *tutti* gli altri elettroni. In termini più precisi supponiamo di avere una particella, un elettrone ad esempio, descritto da una funzione d'onda localizzata, nel senso che il supporto di questa funzione è contenuto in una regione limitata D dello spazio. Consideriamo un altro elettrone la cui funzione d'onda abbia supporto nella regione esterna a D , quindi classicamente si trova "lontano", allora la misura di una qualunque quantità in D non deve dipendere da quest'ultimo elettrone.

Ogni misura può essere scritta tramite proiettori, quindi una misura localizzata in D è caratterizzata da uno stato $|\alpha\rangle$ di singola particella la cui funzione d'onda è localizzata in D . Effettuare una misura localizzata significa occuparsi *solo* dello stato $|\alpha\rangle$ e sommare su tutte le possibilità per l'elettrone esterno, se si misurasse anche questo chiaramente la misura non sarebbe limitata in D . Se non ci fosse la questione della (anti)simmetrizzazione la misura sarebbe definita in questo modo: consideriamo un insieme completo di stati $|\Theta_i\rangle$ con supporto *esterno* a D , la misura della proiezione dello stato a due particelle $|\Psi\rangle$ sarebbe

$$P_\alpha = \sum_i |\langle \alpha | \langle \Theta_i | \Psi \rangle|^2$$

Se Ψ è uno stato come descritto sopra, sarebbe

$$|\Psi\rangle = |\varphi\rangle |W\rangle \quad \text{supp}(\varphi) \subset D ; \text{supp}(W) \subset D^c \quad (11.16)$$

e quindi

$$P_\alpha = \sum_i |\langle \alpha | \langle \Theta_i | \Psi \rangle|^2 = |\langle \alpha | \varphi \rangle|^2 \sum_i \langle \Theta_i | W \rangle = |\langle \alpha | \varphi \rangle|^2 \quad (11.17)$$

L'ultima uguaglianza segue dal fatto che essendo $\text{supp}(W) \subset D^c$, cioè nel complementare di D , W è sviluppabile in serie dei soli stati Θ_i . La (11.17) dice appunto che la misura non dipende da W .

Se ora operiamo, ad esempio, l'antisimmetrizzazione, cambiano due cose: lo stato di partenza deve essere scritto

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi\rangle |W\rangle - |W\rangle |\varphi\rangle) \quad (11.18)$$

mentre gli stati su cui si opera la proiezione sono

$$|X_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle|\Theta_i\rangle - |\Theta_i\rangle|\alpha\rangle) \quad (11.19)$$

Nelle (11.18),(11.19) abbiamo supposto i singoli ket normalizzati, inoltre viste le ipotesi sul supporto:

$$\langle\varphi|W\rangle = 0 \quad \langle\alpha|\Theta_i\rangle = 0 \quad (11.20)$$

quindi il fattore $1/\sqrt{2}$ assicura la corretta normalizzazione degli stati.

La misura è ora espressa da

$$P_\alpha = \sum_i |\langle X_i|\Psi\rangle|^2 = \frac{1}{2} \sum_i 2 (|\langle\alpha|\varphi\rangle|^2 |\langle\Theta_i|W\rangle|^2 - |\langle\Theta_i|\varphi\rangle \langle\alpha|W\rangle|) = |\langle\alpha|\varphi\rangle|^2$$

che coincide con il risultato precedente. Nell'ultimo passaggio si è di nuovo fatto uso della separazione dei supporti.

Quindi correttamente le misure locali non dipendono dalle particelle all'esterno. Si può, e si deve, dimostrare qualcosa in più: se su N elettroni due, ad esempio, sono localizzati e gli altri esterni, la statistica indotta sulla coppia localizzata deve essere proprio quella che si otterrebbe "dimenticando" gli altri elettroni, cioè la coppia deve essere antisimmetrizzata. Dimosteremo questo risultato più generale nel prossimo paragrafo.

11.2.1 Equazione di Schrödinger.

Prima di proseguire è opportuno insistere su un punto: la scelta della statistica è una scelta che **non dipende** da particolari questioni dinamiche, è una proprietà delle osservabili e corrisponde ad una *scelta* fra le possibili proprietà di trasformazione sotto il gruppo delle permutazioni.

Per essere concreti supponiamo di avere un sistema di N particelle identiche che interagiscono fra loro con un potenziale $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$. L'equazione di Schrödinger per il sistema ha la forma

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 \Psi + \sum_{i<j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \Psi \quad (11.21)$$

qualunque sia la forma di statistica: questa determina solo quali soluzioni fra quelle ammesse dalla (11.21) hanno significato fisico e quali no.

Un caso limite è quello di due particelle. Una volta eliminato il moto del centro di massa l'equazione di Schrödinger, stazionaria, per la coordinata relativa è

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r}) \Psi = E \Psi \quad (11.22)$$

a parità di massa ridotta questa equazione è la stessa non solo per particelle con diversa statistica, ma addirittura per particelle diverse fra loro.

Ad esempio nel caso di un potenziale coulombiano gli autovalori corrispondenti a stati legati sarebbero sempre della stessa forma ma solo alcuni fra questi corrisponderebbero a stati fisicamente ammissibili. Per due particelle, poichè $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, lo scambio equivale all'operazione $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, quindi gli stati sono simmetrici o antisimmetrici a seconda che L , il momento angolare relativo, sia pari o dispari. Quindi

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \begin{cases} \text{particelle diverse :} & \forall n \quad L \quad \text{qualsiasi} \\ \text{bosoni :} & \forall n \quad L \quad \text{pari} \\ \text{fermioni :} & \forall n \quad L \quad \text{dispari} \end{cases} \quad (11.23)$$

11.3 Discussione generale.

Poichè è facile “perdersi” nella discussione del caso generale e c’è sempre il rischio di confondere le ipotesi con le tesi affrontiamo l’argomento in modo un pò più formale del solito.

Definizione degli stati.

Lo spazio di Hilbert in questione è

$$\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$$

dove \mathcal{H}_i è lo spazio di Hilbert della singola particella. Stiamo supponendo N fisso. Indicheremo con λ_i un insieme completo di autovalori per lo stato di singola particella. Su questo spazio le permutazioni agiscono rimescolando i vettori di base:

$$P_{ij}|\lambda_1, \dots, \lambda_i \dots \lambda_j \dots \lambda_N\rangle = |\lambda_1, \dots, \lambda_j \dots \lambda_i \dots \lambda_N\rangle \quad (11.24)$$

quindi il gruppo S_N delle permutazioni è rappresentato da operatori unitari.

Ipotesi di indistinguibilità.

Diciamo che le N particelle sono indistinguibili se dato un qualunque stato fisico $|u\rangle$ questo è indistinguibile da $P|u\rangle$, dove $P \in S_N$. qui indistinguibile significa che per qualunque osservabile A

$$\langle u|A|u\rangle = \langle Pu|A|Pu\rangle = \langle u|P^\dagger AP|u\rangle = \langle u|P^{-1}AP|u\rangle \quad (11.25)$$

Notiamo che la (11.25) è in pratica una restrizione sulle osservabili.

Conseguenze sulle osservabili.

La (11.25) implica

$$[A, P] = 0 \quad A \text{ osservabile} \quad (11.26)$$

Consideriamo infatti due stati $|u\rangle, |v\rangle$ e formiamo le combinazioni

$$\Phi_1 = |u\rangle + \alpha|v\rangle \quad \Phi_2 = |u\rangle + i\alpha|v\rangle \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

Scrivendo la (11.25) per $|\Phi_1\rangle$ e $|\Phi_2\rangle$ e confrontando fra loro le due espressioni si ricava subito

$$\langle u|A|v\rangle = \langle u|P^{-1}AP|v\rangle \quad \forall |u\rangle, |v\rangle \quad (11.27)$$

che implica la (11.26).

Nota: Nella dimostrazione della (11.27) si è implicitamente assunto che gli stati Φ_1 e Φ_2 siano realizzabili. A priori è possibile che nello spazio di Hilbert agiscano delle regole di superselezione e non tutti gli stati corrispondano a stati fisici, ad esempio se si assume che la carica elettrica sia superseletta e $|u\rangle, |v\rangle$ appartengono a settori con carica diversa, allora non si può considerare una sovrapposizione coerente di tali stati. In tal caso però gli elementi di matrice di qualunque osservabile fra settori superseletti sono nulli e la permutazione si suppone non coinvolga la regola di superselezione quindi P manda ogni settore dello spazio di Hilbert in se stesso, in questo caso entrambi gli elementi di matrice nella (11.27) sono nulli e l’uguaglianza continua a valere.

Assumendo che l’Hamiltoniana sia una osservabile, discende che essa deve commutare con le permutazioni, cioè deve essere simmetrica. Questo implica che l’operatore di evoluzione temporale commuta con le permutazioni.

Evoluzione degli stati e regole di selezione.

Il gruppo S_N è un gruppo finito e, come visto, lo spazio $\mathcal{H}^{(N)}$ è sede di una rappresentazione di questo gruppo, cioè ad ogni permutazione corrisponde un operatore unitario in $\mathcal{H}^{(N)}$. È noto dalla teoria delle rappresentazioni dei gruppi² che ogni rappresentazione (unitaria) di un gruppo finito è completamente riducibile. Nel nostro contesto questo significa: il gruppo S_N ha un certo insieme di rappresentazioni irriducibili, finito dimensionali, indichiamo queste rappresentazioni con R_λ . Lo spazio di Hilbert è scrivibile come somma diretta

$$\mathcal{H}^{(N)} = \bigoplus_{\lambda, \tau} R_{\lambda, \tau} \quad (11.28)$$

τ indica i numeri quantici aggiuntivi che servono a distinguere una rappresentazione irriducibile da un'altra unitariamente equivalente.

Facciamo un breve inciso per il lettore poco familiare con queste notazioni. Classificare le rappresentazioni irriducibili di S_N significa classificare i modi possibili in cui un sottospazio lineare va in se stesso sotto l'azione del gruppo. Un sottospazio R_λ è un sottospazio di dimensione finita. Ogni vettore si trasforma sotto S_N , un sottospazio è irriducibile se non ci sono combinazioni lineari di vettori che rimangono invarianti. Ad ogni rappresentazione corrisponde un tipo di "simmetria" che qui è codificata dal numero λ . Tecnicamente ogni rappresentazione irriducibile di S_N è in corrispondenza con un tableau di Young (v. ??), λ indica di quale tableau si sta parlando. La decomposizione (11.28) significa che si può scegliere una base in $\mathcal{H}^{(N)}$ assegnando ad ogni vettore della base una definita proprietà di trasformazione sotto S_N . Logicamente possono esistere molti sottospazi con lo stesso tipo di simmetria, l'indice τ distingue questi sottospazi. Come analogia il lettore può pensare alla classificazione $|n, \ell, m\rangle$ degli autostati dell'atomo di idrogeno. λ è il corrispettivo di ℓ , che per l'atomo di idrogeno identifica gli stati che si trasformano in modo irriducibile sotto rotazioni. l'indice m è l'etichetta assegnata ai vari vettori di base in questi sottospazi, che nella (11.28) sarebbero i vettori di base in ogni $R_{\lambda, \tau}$, l'indice n infine è l'analogo di τ : per ogni momento angolare assegnato esistono diversi, infiniti, sottospazi: quelli con $n = \ell + 1, \ell + 2 \dots$

Un punto importante per il seguito è che il gruppo S_N ha **solo due** rappresentazioni irriducibili unidimensionali, quella corrispondente agli stati simmetrici e quella corrispondente agli stati antisimmetrici, tutte le altre rappresentazioni, che corrispondono a simmetrie "miste" hanno dimensione maggiore di uno.

La relazione (11.27) impone una **regola di selezione esatta** fra i vari settori dello spazio di Hilbert. Ricordiamo l'enunciato dei due lemmi di Schür sulle rappresentazioni dei gruppi adattati alle nostre esigenze³:

- 1) Se un operatore A commuta con tutti gli elementi del gruppo⁴ allora può avere elementi di matrice non nulli **solo** fra rappresentazioni irriducibili equivalenti. Nel nostro caso fra stati che si trasformano nello stesso modo sotto il gruppo S_N , cioè con lo stesso indice λ .
- 2) Se A è un operatore hermitiano che commuta con tutti gli elementi del gruppo allora la matrice che rappresenta A all'interno di una data rappresentazione è un multiplo dell'identità.

Per richiamare un caso noto: se nell'atomo di idrogeno consideriamo gli elementi di matrice di un operatore invariante sotto rotazioni, ad esempio una funzione di $r = |\mathbf{x}|, f(r)$, il primo lemma ci dice che gli unici elementi non nulli sono fra stati con lo stesso ℓ , anche se n può essere diverso. Il

²Lo studente può trovare un riassunto dei risultati principali nel capitolo ??.

³Per il lettore che ha studiato i gruppi: le rappresentazioni in Meccanica Quantistica sono rappresentazioni su uno spazio vettoriale su \mathbb{C} . La formulazione dei lemmi di Schür è quella adattata a questo caso.

⁴Sarebbe più corretto dire che commuta con gli operatori che rappresentano il gruppo, ma tralasciamo queste finezze linguistiche.

secondo lemma ci dice che per questi elementi di matrice vale la regola di selezione $m' = m$ e che gli elementi di matrice sono indipendenti da m . Scrivendo esplicitamente

$$\langle n', \ell', m' | f | n, \ell, m \rangle = \int R_{n'\ell'} Y_{\ell', m'}^*(\theta, \varphi) f(r) R_{n\ell} Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

vediamo che si tratta semplicemente della ortogonalità delle funzioni $Y_{\ell, m}$.

Siccome abbiamo già visto che tutte le osservabili commutano con gli elementi del gruppo questo implica che

- 1) Non esistono osservabili che connettono stati a simmetria diversa.
- 2) Siccome H è un'osservabile l'evoluzione temporale non mischia stati a simmetria diversa, basta per esempio scrivere, per piccoli Δt

$$\psi(t + \Delta t) = \psi(t) - iH\Delta t\psi(t)$$

Insistiamo sul fatto che queste regole di selezione sono esatte. Questa situazione ci dice in realtà che i vari settori a simmetria diversa sono superseletti: non è possibile fare una transizione da un settore all'altro. Se decomponiamo uno stato qualunque usando la (11.28), ed indicando con μ l'indice che serve a distinguere i vettori di base in ogni sottospazio $R_{\lambda, \tau}$ possiamo scrivere

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda, \tau, \mu} C_{\lambda, \tau, \mu} |\lambda, \tau \mu\rangle \quad (11.29)$$

ovvero, raggruppando i termini con lo stesso valore di λ

$$|\Psi\rangle = |\Phi_{\lambda_1}\rangle + |\Phi_{\lambda_2}\rangle + \dots + |\Phi_{\lambda_n}\rangle \quad (11.30)$$

dove n , il numero di termini nella somma, è il numero delle rappresentazioni irriducibili di S_N . Se consideriamo il valor medio di un'osservabile abbiamo, sempre per il lemma di Schür

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_{i, j} \langle \Phi_{\lambda_i} | A | \Phi_{\lambda_j} \rangle = \sum_i \langle \Phi_{\lambda_i} | A | \Phi_{\lambda_i} \rangle \quad (11.31)$$

Non ci sono termini di interferenza fra i settori con λ diverso ed il risultato (11.31) è lo stesso che avremmo ottenuto nel caso di uno stato descritto da una matrice densità

$$\rho = \sum_i |\Phi_{\lambda_i}\rangle \langle \Phi_{\lambda_i}|$$

questo è appunto il significato di una regola di superselezione.

Vediamo quindi che ci sono due possibilità

- a) Più di una rappresentazione R_λ interviene nella descrizione degli stati, ed allora necessariamente la descrizione quantistica del sistema avviene tramite una matrice densità.
- b) Nella somma (11.31) interviene un solo termine, ed allora la descrizione avviene tramite uno stato puro.

Notiamo che fino a questo punto non abbiamo fatto nessuna ipotesi sulla simmetrizzazione o meno degli stati.

Preparazione degli stati.

Per decidere quale delle due alternative illustrate precedentemente scegliere, dobbiamo fare qualche affermazione su come possiamo preparare gli stati. Nella meccanica quantistica di singola particella normalmente si assume, e questo è necessario per l'interpretazione fisica della teoria, che esista un insieme completo di osservabili compatibili. Il che significa che uno stato può essere in linea di principio "preparato" misurando contemporaneamente un sufficiente numero di osservabili. Insieme completo qui significa che non resta nessuna degenerazione e lo spazio risultante ha dimensione uno. Normalizzando lo stato questo significa che l'unica arbitrarietà che resta dall'effettuazione delle misure è un fattore di fase e questo è appunto il motivo per cui gli stati fisici sono rappresentati da raggi nello spazio di Hilbert. Notiamo, per inciso, l'unicità della soluzione dell'equazione di Schrödinger rappresenta un esempio di realizzazione di questo postulato non è una "dimostrazione" del postulato.

Questo aspetto della definizione degli stati di un sistema viene spesso inconsciamente trascurato quando si studia la rappresentazione di Schrödinger ed in particolare si cercano gli autostati dell'Hamiltoniana. Ad esempio quando si scrivono gli autostati $R_{nl}Y_{lm}$ questi sono sicuramente unici, ed in effetti la fase è stata fissata scegliendo le funzioni R_{nl} reali e la fase opportuna per le armoniche sferiche. In quale punto abbiamo imposto la questione della unidimensionalità dello spazio dei vettori fisici? Sembra che tutto sia un teorema: il teorema di esistenza e unicità della soluzione dell'equazione di Schrödinger. In realtà abbiamo imposto una condizione: che la soluzione sia normalizzabile, e quindi in L^2 , oppure, nel caso dello spettro continuo, che sia limitata all'infinito. In mancanza di questo vincolo non è vero che la soluzione dell'equazione è unica e non è neanche vero che H è un operatore autoaggiunto. Una volta imposto questo vincolo abbiamo scelto le osservabili H, L^2, L_z per caratterizzare completamente lo stato. Un esempio ancora più esplicito è il caso di una particella libera limitata in un segmento; se non imponiamo nessuna condizione al contorno non è affatto vero che la soluzione dell'equazione di Schrödinger è unica e lo spettro che otteniamo dipende appunto dalle condizioni al contorno imposte. Se pensiamo alle condizioni al contorno come un esempio di come si possano vincolare gli stati possibili, o "preparare" gli stati, questo è un classico esempio in cui possiamo ottenere stati diversi a seconda della definizione del nostro sistema.

Nel caso di un sistema di N particelle la situazione è più complicata. Come al solito assumiamo ci sia un insieme massimale di osservabili compatibili, massimale significa che non possiamo aggiungere osservabili in modo da eliminare eventuali degenerazioni del sistema, in altre parole facciamo il meglio possibile per determinare i numeri quantici. Il problema è che nel caso ad N particelle in generale **non è vero** che arriviamo ad uno spazio unidimensionale. Sia infatti $|u\rangle$ uno stato "preparato" nel modo suddetto. Per l'ipotesi di indistinguibilità tutti gli stati $P|u\rangle$ corrispondono alla stessa situazione fisica. La dimensione dello spazio a cui si arriva è perciò la dimensione dello spazio generato per combinazioni lineari dai vettori di tipo $P|u\rangle$. Il meglio che possa succedere è essere in una rappresentazione irriducibile, ma non c'è modo di distinguere un vettore dall'altro all'interno di questa rappresentazione, sempre per il lemma di Schür. Siamo in una situazione analoga a quella che fa passare dai vettori ai raggi dello spazio di Hilbert ma ora l'arbitrarietà non è semplicemente una fase.

Scelta della simmetria e consistenza dell'ipotesi.

Se vogliamo avere una descrizione del sistema attraverso stati puri siamo perciò condotti a fare un'ipotesi che generalizza, in generale, il passaggio da vettore a raggio di uno spazio di Hilbert; gli stati fisici corrispondono ad una simmetria fissata del gruppo delle permutazioni. Qualunque delle scelte fatte è consistente e, ancora più importante, l'arbitrarietà rimanente è ininfluenza su qualunque osservabile, esattamente come l'indipendenza dalla fase nel caso normale.

Consideriamo infatti, per una data scelta di λ due stati diversi che trasformano secondo la stessa R_λ e che appartengono allo stesso sottospazio determinato da una misura massi-

male come detto precedentemente, questo significa che le osservabili usate fissano l'indice τ fra i vari sottospazi $R_{\lambda\tau}$. Siano $|u\rangle, |v\rangle$ questi stati. il secondo lemma di Schür ci assicura che all'interno del sottospazio R_λ gli elementi di matrice di ogni osservabile simmetrica sono un multiplo della matrice identica, quindi sicuramente

$$\langle u|A|u\rangle = \langle v|A|v\rangle$$

In conclusione qualunque scelta della simmetria λ è compatibile con l'usuale descrizione quantistica del sistema. Rinunciare a scegliere una simmetria fissata porta ad una descrizione tramite una matrice statistica. La scelta della simmetria, per gli stessi motivi visti precedentemente, è compatibile con l'evoluzione temporale del sistema.

Per completezza diciamo che tutta questa problematica può essere affrontata ad un livello più astratto studiando direttamente l'algebra delle osservabili.

11.3.1 Simmetrizzazione e Antisimmetrizzazione

Fra tutte le scelte possibili, comprese quella della descrizione attraverso una matrice statistica, quella realizzata in natura è la più semplice:

Postulato di simmetrizzazione *Gli stati fisici ad N particelle si trasformano secondo la rappresentazione simmetrica, bosoni, o antisimmetrica, fermioni, del gruppo S_N . In natura i bosoni hanno spin intero ed i fermioni spin semi-intero.*

Naturalmente l'associazione fra simmetria dello stato e spin delle particelle a questo livello è un postulato, o un'evidenza sperimentale. Come già detto in un altro ambito questo è un teorema.

Notiamo che le due rappresentazioni considerate sono le uniche rappresentazioni unidimensionali del gruppo S_N questo significa che in questo caso, e solo in questo, l'arbitrarietà dello stato si riduce ad una fase, cioè ricadiamo nella stessa situazione del caso di singola particella. In alcuni testi si trova l'affermazione errata che dovendo le permutazioni portare da uno stato ad uno equivalente ed essendo gli stati determinati a meno di una fase

$$P|u\rangle = c|u\rangle \quad |c| = 1 \quad (11.32)$$

La (11.32) in realtà asserisce che la realizzazione del gruppo delle permutazioni è unidimensionale, o equivalentemente che esiste un insieme di osservabili compatibili che hanno come sottospazio invariante uno spazio unidimensionale, ma siccome le uniche rappresentazioni unidimensionali di S_N sono appunto quelle simmetrica e antisimmetrica, la (11.32) è equivalente al postulato di simmetrizzazione.

Il postulato di simmetrizzazione è equivalente ad un'altra assunzione che è fisicamente più "ragionevole". Consideriamo un sistema di N particelle e supponiamo di avere misurato per ognuna di essere un insieme completo di numeri quantici, ad esempio in un processo d'urto abbiamo misurato impulso e spin di ogni particella. Questa misura individua univocamente lo stato? In altre parole siamo in presenza di un insieme massimale di misure nel senso prima esposto? La risposta in generale è no, questo succede **solo** nel caso delle rappresentazioni simmetriche e antisimmetrica, quindi assumere che la misura dei numeri quantici delle singole particelle determini lo stato del sistema, cosa fisicamente molto ragionevole, è equivalente ad assumere il postulato di simmetrizzazione.

Vediamo una dimostrazione di questo fatto. Supponiamo che $|q_1 \dots q_N\rangle$ sia uno stato in $\mathcal{H}^{(N)}$ che appartiene allo spazio individuato dalle nostre misure, cioè la particella 1 ha numero quantici q_1 , la 2 q_2 etc. Per l'identità delle particelle tutti gli stati ottenuti applicando una permutazione a questo stato sono equivalenti. Di questi stati, in generale, se i q_i sono differenti, ne esistono $N!$, lo spazio generato da tutti questi vettori, $P_1|q_1 \dots q_N\rangle, P_2|q_1 \dots q_N\rangle \dots$ è uno spazio vettoriale di dimensione $N!$ che costituisce la

cosiddetta *rappresentazione regolare* di S_N . Come tutte le rappresentazioni anche questa rappresentazione è completamente riducibile

$$R_{reg} = \bigoplus R_{\lambda, \tau} \quad (11.33)$$

Quello che si può dimostrare è che in questa rappresentazione ogni simmetria, cioè ogni λ compare un numero di volte pari alla sua dimensione, quindi una rappresentazione di dimensione 3 comparirà 3 volte etc. Le uniche rappresentazioni che compaiono una sola volta sono le rappresentazioni unidimensionali, cioè quella simmetrica e antisimmetrica.

Supponiamo ora che valga il postulato che gli stati fisici siano stati che si trasformano secondo una rappresentazione fissata λ_0 . Questa sarà l'unica a comparire nella (11.33) e comparirà, in generale, un numero $\dim(R_{\lambda_0})$ volte. Quindi questo tipo di misure non sono mai una misura massimale, che dovrebbe portare alla comparsa di un'unica rappresentazione R_{λ_0} . L'unica eccezione sono appunto le rappresentazioni selezionate dal postulato di simmetrizzazione.

Notiamo comunque che un insieme di misure di questo tipo non può distinguere fra una statistica bosonica ed una fermionica, entrambe appaiono una sola volta nelle decomposizione ma per sapere quale delle due compare occorre fare una misura di correlazione fra le particelle. Questo è abbastanza intuitivo: se si prepara ad esempio uno stato di due elettroni per decidere se è simmetrico o antisimmetrico si può, ad esempio, verificare se i due elettroni possono o no esistere nello stesso stato, ma questa appunto è una misurazione sulla coppia di elettroni, non sui singoli elettroni presi separatamente.

11.3.2 Simmetrizzazione e fattorizzazione.

Come abbiamo cercato di sottolineare precedentemente l'imposizione di una simmetria oltre a richiedere una consistenza matematica richiede una consistenza fisica. In particolare si vorrebbe che la presenza di eventuali particelle al di fuori di una regione limitata D non influenzi le misure ristrette a D . Abbiamo dimostrato come questo funziona per misure di singola particella nel paragrafo 11.2 per statistiche fermioniche. Mostriamo ora che effettivamente nel caso fermionico il disaccoppiamento delle particelle esterne alla regione D non cambia il tipo di statistica. Nel caso bosonico il risultato è identico, lasciamo al lettore la dimostrazione.

Consideriamo un sistema composto da N fermioni, elettroni ad esempio, due di questi hanno una funzione d'onda φ localizzata in D , gli altri $N - 2$ sono localizzati al di fuori di D , con funzione d'onda W . Se pensiamo ai due gruppi come disaccoppiati lo stato del sistema dovrebbe essere $|\varphi\rangle|W\rangle$ dove $|\varphi\rangle$ è antisimmetrico rispetto alle prime due particelle e $|W\rangle$ antisimmetrico rispetto alle $N - 2$ restanti.

Considerando come nel paragrafo 11.2 un insieme completo di vettori $|\Theta_i\rangle$ antisimmetrici e aventi supporto nel complementare di D , $\text{supp}(\Theta_i) \subset D^c$ il risultato di una misura sarebbe esprimibile tramite

$$P_\alpha = \sum_i |\langle \alpha | \langle \Theta_i | \varphi \rangle | W \rangle|^2 = |\langle \alpha | \varphi \rangle|^2 \sum_i |\langle \Theta_i | W \rangle|^2 = |\langle \alpha | \varphi \rangle|^2 \quad (11.34)$$

dove $|\alpha\rangle$ è uno stato antisimmetrico a due particelle. Dimostriamo ora che si ottiene lo stesso risultato se si considera lo stato completamente antisimmetrizzato.

Lo stato completamente antisimmetrizzato è

$$|\Phi\rangle = CA|\varphi\rangle|W\rangle = C \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon_P P|\varphi\rangle|W\rangle$$

dove C è una costante di normalizzazione. Calcoliamo C .

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = C^2 \langle \varphi | \langle W | A^2 | \varphi \rangle | W \rangle = C^2 \langle \varphi | \langle W | A | \varphi \rangle | W \rangle$$

le permutazioni possono essere distinte in due gruppi, nel primo gruppo quelle che scambiano separatamente le prime due particelle e le restanti altre $N - 2$, nel secondo gruppo quelle che mischiano almeno una delle due particelle con quelle rappresentate da W . Queste seconde non danno alcun contributo perchè i supporti di φ e W sono distinti, ad esempio

$$\int \varphi(x_1, x_2)W(x_3 \dots x_N)\varphi(x_1, x_3)W(x_2, x_4, \dots x_N) = 0$$

perchè nel prodotto $\varphi(x_1, x_2)W(x_2, x_4, \dots x_N)$ o è zero φ se $x_2 \in D^c$ o è zero W , se $x_2 \in D$. le permutazioni del primo gruppo danno

$$P|\varphi\rangle|W\rangle = \epsilon_P|\varphi\rangle|W\rangle$$

appunto perchè φ e W sono stati antisimmetrici, quindi tutti i contributi sono uguali e sono in numero di $2!(N - 2)!$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = C^2 \frac{2!(N - 2)!}{N!} \quad C = \left(\frac{N!}{2!(N - 2)!} \right)^{1/2}$$

Consideriamo ora la base Θ_i già introdotta, La misura P_α è espressa da vettori

$$|X_i\rangle = CA|\alpha\rangle|\Theta_i\rangle$$

e la costante di normalizzazione è la stessa di prima, perchè α e Θ_i hanno le stesse caratteristiche di supporto di φ e W .

Quindi

$$P_\alpha = \sum_i |\langle X_i | \Phi \rangle|^2 = C^2 \frac{1}{N!} \sum_i |\langle \alpha | \langle \Theta_i | \epsilon_P P | \varphi \rangle | W \rangle|^2$$

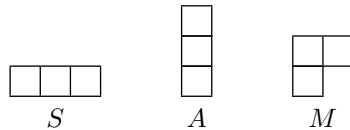
Dividendo come prima le partizioni in due gruppi si ha:

$$P_\alpha = C^2 \frac{2!(N - 2)!}{N!} |\langle \alpha | \varphi \rangle|^2 \sum_i |\langle \Theta_i | W \rangle|^2 = |\langle \alpha | \varphi \rangle|^2 \quad (11.35)$$

che coincide con il risultato aspettato (11.34). Questa dimostrazione si estende con facilità ad ogni sottogruppo di k particelle fra le N considerate e dimostra che la statistica ‘locale’ indotta dal disaccoppiamento di un certo numero di particelle è identica alla statistica del sottogruppo considerato.

Un risultato analogo vale per l’evoluzione temporale. Come già detto l’operatore di evoluzione temporale U commuta con tutte le permutazioni e per il lemma di Schür può connettere solo rappresentazioni equivalenti sotto S_N . Siccome di rappresentazioni irriducibili antisimmetriche ne esiste solo una, se si parte da uno stato antisimmetrico si evolve in uno stato antisimmetrico. Lo stesso vale nel caso simmetrico.

Questa proprietà di ‘riduzione’ si perde nel caso di statistiche miste. Consideriamo ad esempio tre particelle. Le rappresentazioni irriducibili del gruppo S_3 sono rappresentabili tramite i tableaux di Young



Le variabili che descrivono le tre particelle si intendono distribuite nelle caselle, simmetrizzando sulle righe e antisimetrizzando sulle colonne. Le rappresentazioni di tipo M corrispondono a simmetrie miste. È abbastanza intuitivo che togliendo uno stato dalla prima riga della rappresentazione M si finisce in uno stato antisimmetrico a due particelle, togliendo lo stato della seconda riga in uno stato simmetrico. Se l’accoppiamento con lo

stato che si toglie è piccolo, perchè ad esempio rappresenta una particella distante dal sistema, questo implica che per effetto dell'interazione si può passare da stati simmetrici a stati antisimmetrici di due particelle che approssimativamente, trascurando la presenza del terzo stato, fornirebbero una rappresentazione del sistema. Applicato agli elettroni questo avrebbe conseguenze piuttosto drastiche: come vedremo il fatto che per gli elettroni valga la statistica antisimmetrica implica il principio di Pauli, che impedisce a due elettroni di avere gli stessi numeri quantici. Ad esempio classificando gli stati con la stessa convenzione usata per l'idrogeno, solo due elettroni possono occupare l'orbita $1s$, i due elettroni differiscono per il numero quantico di spin, diciamo per uno $s_z = +1/2$, per l'altro $s_z = -1/2$. Se ci fosse la possibilità di violare questo principio un elettrone di energia superiore in un atomo a molti elettroni, potrebbe venire catturato nell'orbita $1s$ con conseguente emissione di luce, raggi X tipicamente, che sarebbero facilmente rivelabili. Un esperimento di questo tipo è stato effettivamente eseguito, ponendo un limite al possibile mescolamento fra stati a simmetria diversa. In appendice 1 il lettore può trovare un esame più dettagliato di questo problema.

Ogni processo fisico di interazione fra due sistemi A, B , "separati" può essere pensato come la preparazione dei due sistemi, l'evoluzione del sistema composto e l'eventuale successiva separazione.

Quanto abbiamo visto in questo paragrafo ci dice che, preparando i due sistemi con una statistica antisimmetrica:

- 1) Questa preparazione è consistente con l'assumere una statistica antisimmetrica complessiva per il sistema $A + B$. Questo è abbastanza ovvio perchè fra le funzioni d'onda dei due sistemi non c'è sovrapposizione, sono separati appunto.
- 2) Nel corso dell'evoluzione temporale la simmetria *globale* viene preservata.
- 3) Nella, eventuale, separazione del sistema in due parti, $C + D$, le singole parti ereditano la statistica di partenza, cioè sono ancora antisimmetriche nelle loro componenti. Questo è quello che abbiamo dimostrato nel caso di una coppia di particelle, il lettore è invitato a generalizzare la dimostrazione per un insieme arbitrario di particelle.

Lo stesso discorso può essere fatto nel caso bosonico.

11.4 Costruzione degli stati.

Da questo punto in poi supporremo la validità del principio di simmetrizzazione. In questo paragrafo vogliamo analizzare più in dettaglio come si scrivono gli stati del sistema in questa ipotesi.

Sia $|\lambda_i\rangle$, al variare di i , una base per lo spazio di Hilbert di singola particella. Una base per lo spazio $\mathcal{H}^{(N)}$ è formata da

$$|\lambda_{i_1}\rangle \otimes |\lambda_{i_2}\rangle \dots |\lambda_{i_N}\rangle \equiv |\lambda_{i_1}\rangle |\lambda_{i_2}\rangle \dots |\lambda_{i_N}\rangle \quad (11.36)$$

Nella seconda forma abbiamo sottinteso il simbolo \otimes . La (11.36) specifica uno stato in cui la prima particella è nello stato λ_{i_1} , la seconda nello stato λ_{i_2} e così via.

Il postulato di simmetrizzazione in pratica afferma che gli stati fisici ad N particelle, $\mathcal{E}^{(N)}$ corrispondono ad un sottospazio di $\mathcal{H}^{(N)}$:

$$\mathcal{E}^{(N)} = \begin{cases} \mathcal{S}[\mathcal{H}^{(N)}] & \text{stati simmetrici, bosoni} \\ \mathcal{A}[\mathcal{H}^{(N)}] & \text{stati antisimmetrici, fermioni} \end{cases} \quad (11.37)$$

Una base, non normalizzata, per questi spazi è definita da

$$\mathcal{S}[\mathcal{H}^{(N)}] : \sum_P P |\lambda_{i_1}\rangle |\lambda_{i_2}\rangle \dots |\lambda_{i_N}\rangle \quad (11.38a)$$

$$\mathcal{A}[\mathcal{H}^{(N)}] : \sum_P \epsilon_P P |\lambda_{i_1}\rangle |\lambda_{i_2}\rangle \dots |\lambda_{i_N}\rangle \quad (11.38b)$$

Un punto da sottolineare è che gli stati sono definiti affermando quali stati di singola particella sono presenti, non dipendono cioè da quale particella occupa un dato stato, questa nozione si perde nel processo di (anti)simmetrizzazione. Questa osservazione è alla base di una rappresentazione alternativa a quella usuale di Schrödinger, la rappresentazione di Fock, che sarà illustrata più avanti.

Nella (11.38b) è contenuta un'affermazione fondamentale che rendiamo esplicita:

Principio di Pauli: *Due fermioni non possono occupare lo stesso stato.*

Infatti se due fra gli stati $|\lambda_i\rangle$ sono uguali il processo di antisimmetrizzazione annulla l'espressione (11.38b). Notiamo che il principio di Pauli è stato formulato **prima** ancora della nascita della Meccanica Quantistica nella sua forma attuale[14].

Un esempio per le (11.38): se gli stati $|\lambda_i\rangle$ sono una base ortonormale per \mathcal{H} dei vettori di base normalizzati per il caso a due particelle sono della forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\lambda_1\rangle |\lambda_2\rangle + |\lambda_2\rangle |\lambda_1\rangle) & \text{ bosoni} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\lambda_1\rangle |\lambda_2\rangle - |\lambda_2\rangle |\lambda_1\rangle) & \text{ fermioni} \end{aligned}$$

Un esempio pratico è fornito da una coppia di elettroni di impulso $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ e proiezione dello spin su un asse z, σ_1, σ_2 :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}_1, \sigma_1\rangle |\mathbf{p}_2, \sigma_2\rangle - |\mathbf{p}_2, \sigma_2\rangle |\mathbf{p}_1, \sigma_1\rangle)$$

11.4.1 Normalizzazione degli stati.

Per brevità scriveremo

$$|\lambda_1, \lambda_2 \dots\rangle = |\lambda_1\rangle |\lambda_2\rangle \dots$$

per indicare uno stato in cui la prima particella ha numeri quantici λ_1 , la seconda λ_2 etc. Useremo lo stesso ordine per i vettori duali: $\langle \lambda_1, \lambda_2 \dots |$. Data una base, ortonormale, $|\lambda_i\rangle$, per gli stati di singola particella, è facile calcolare le costanti di normalizzazione per la base (11.38). Sia N il numero totale di particelle, n_i il numero di particelle nello stato λ_i con

$$n_{i_1} + \dots + n_{i_N} = N \quad (11.39)$$

Si ha:

$$|\lambda_1, \lambda_2 \dots\rangle_S = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}} \mathcal{S} |\lambda_1, \lambda_2 \dots\rangle \quad (11.40a)$$

$$|\lambda_1, \lambda_2 \dots\rangle_A = \sqrt{N!} \mathcal{A} |\lambda_1, \lambda_2 \dots\rangle = \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_P \epsilon_P |\lambda_1, \lambda_2 \dots\rangle \quad (11.40b)$$

Dimostrazione. Consideriamo ad esempio la (11.40a), che è il caso più complicato. Collezioni diverse di autovalori λ_i danno evidentemente stati ortogonali. Per collezioni uguali, esplicitando l'operatore \mathcal{S} :

$$s \langle \lambda_1, \lambda_2 \dots | \lambda_1, \lambda_2 \dots \rangle_S = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots} \frac{1}{(N!)^2} \sum_Q Q \langle \lambda_1, \lambda_2 \dots | \cdot \sum_P P |\lambda_1, \lambda_2 \dots\rangle$$

Tutti gli $N!$ addendi ottenuti permutando con Q danno lo stesso contributo sullo stato simmetrizzato con le permutazioni P , quindi resta

$$\frac{1}{n_1!n_2!\dots} \langle \lambda_1, \lambda_2 \dots | \cdot \sum_P P | \lambda_1, \lambda_2 \dots \rangle$$

Nel prodotto scalare sono non nulli, e valgono 1, solo i vettori che hanno gli autovalori λ_i nello stesso ordine del vettore $\langle \lambda_1, \lambda_2 \dots |$ e questi sono appunto quelli che si ottengono permutando i sottogruppi a λ_i fisso, e sono $n_1!n_2!\dots$, da cui segue la (11.40a). Il procedimento si può anche formalizzare usando il fatto che \mathcal{S} è un proiettore, quindi $\mathcal{S}^\dagger = \mathcal{S}$ e $\mathcal{S}^2 = \mathcal{S}$.

La (11.40a) può essere semplificata notando che il vettore $|\lambda_1, \lambda_2 \dots \rangle$ rimane invariato se si permutano fra loro gli autovalori λ_i uguali fra loro. Le permutazioni di questo tipo, oltre all'identità, formano un sottogruppo S_N^0 del gruppo delle permutazioni, il sottogruppo di isotropia del vettore. Possiamo immaginare di scrivere ogni permutazione come il prodotto di una permutazione appartenente a S_N^0 e di una che cambia λ_i non uguali fra loro, questo equivale a passare al gruppo quoziente S_N/S_N^0 . Tutte le permutazioni di S_N^0 lasciano il vettore invariato e sono in numero di $n_1!n_2!\dots$, quindi

$$|\lambda_1, \lambda_2 \dots \rangle_S = \sqrt{\frac{n_1!n_2!\dots}{N!}} \sum_{P'} |\lambda_1, \lambda_2 \dots \rangle \quad (11.41)$$

dove la somma è fatta sulle sole permutazioni "effettive", quelle cioè che cambiano il vettore. Come esempio il lettore può verificare che usando la (11.41) o la (11.40a) si ottiene in ogni caso:

$$|\lambda_1, \lambda_1, \lambda_2 \rangle_S = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\lambda_1, \lambda_1, \lambda_2 \rangle + |\lambda_1, \lambda_2, \lambda_1 \rangle + |\lambda_2, \lambda_1, \lambda_1 \rangle \right)$$

11.4.2 Misure e proiettori.

Uno dei più frequenti motivi di confusione nell'uso degli stati simmetrizzati è dato dalla scrittura dei proiettori, vediamo quindi di chiarire alcuni punti. Trattiamo il caso bosonico, che è il più complicato.

Uno stato generico per N particelle ha la forma di una combinazione lineare degli stati di base (11.40a):

$$|\psi\rangle = \sum C_{\lambda_1\dots} |\lambda_1, \lambda_2 \dots \rangle_S \quad (11.42)$$

Una misura su $|\psi\rangle$ fornirà l'insieme di variabili $\{\lambda_1 \dots\}$ con probabilità $|C_{\lambda_1\dots}|^2$, e questa misura è rappresentata dal proiettore sul corrispondente autostato

$$\Pi_{\lambda_1, \lambda_2 \dots} = |\lambda_1, \lambda_2 \dots \rangle_S \langle \lambda_1, \lambda_2 \dots | \quad (11.43)$$

Vale a dire, usando la (11.40a)

$$|C_{\lambda_1\dots}|^2 = \langle \psi | \Pi_{\lambda_1, \lambda_2 \dots} | \psi \rangle = \frac{N!}{n_1!n_2!\dots} \left| \frac{1}{N!} \sum_P \langle \lambda_1, \lambda_2 \dots | \psi \rangle \right|^2 \quad (11.44)$$

Siccome $|\psi\rangle$ è simmetrico tutti gli addendi ($N!$) dovuti alla somma sulle permutazioni P nella (11.44) danno lo stesso contributo, quindi

$$|C_{\lambda_1\dots}|^2 = \frac{N!}{n_1!n_2!\dots} |\langle \lambda_1, \lambda_2 \dots | \psi \rangle|^2 \quad (11.45)$$

Innanzitutto la (11.45) ci dice che basta calcolare l'elemento di matrice su uno stato *non simmetrizzato*, inoltre è consistente con la seguente interpretazione. La misura di numeri

quantici $\lambda_1 \dots$ deve essere scrivibile come somma simmetrizzata di misure individuali sulle singole particelle. Immaginiamo di associare un rivelatore ad ogni misura, allora

$$|\lambda_1, \lambda_2, \dots\rangle\langle\lambda_1, \lambda_2, \dots| \quad (11.46)$$

significa effettuare una misura che dà risultato λ_1 per la prima particella, λ_2 per la seconda etc. La simmetrizzazione della misura corrisponde a simmetrizzare gli operatori (11.46). Delle $N!$ permutazioni però, $n_1! \cdot n_2! \dots$ corrispondono alla stessa operazione, solo le permutazioni distinte corrispondono a misurare qualcosa di diverso, quindi la misura è espressa da

$$\mathcal{M} = \sum_P' P|\lambda_1, \lambda_2, \dots\rangle\langle\lambda_1, \lambda_2, \dots|P^\dagger \quad (11.47)$$

la somma è sulle permutazioni effettive. Un esempio esplicito di questo tipo di conteggio è dato nel paragrafo ???. Notiamo che la permutazione che agisce sul vettore e sul suo duale nella (11.47) è la stessa. Ad esempio una misura di impulso

$$|\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\rangle\langle\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2|$$

significa che la prima e la seconda particella hanno impulso \mathbf{p}_1 , la terza \mathbf{p}_2 , non ha senso ovviamente permutare fra loro i primi due impulsi.

Infine un'ultima precisazione. In molte situazioni si calcola una ampiezza di probabilità per un certo evento, corrispondente al calcolo di

$$A_{\lambda_1\dots} = {}_S\langle\lambda_1, \lambda_2, \dots|\psi\rangle \quad (11.48)$$

Sottolineiamo che lo stato finale nella (11.48) è quello *simmetrizzato*. Se si desidera sommare su tutte le possibilità dello stato finale occorre effettuare la somma

$$P = \sum_{\text{stati fin.}} |A_{\lambda_1\dots}|^2 \quad (11.49)$$

La somma (11.49) non è su variabili indipendenti, perchè lo scambio di due variabili porta allo stesso stato. Per semplicità pensiamo al caso di N impulsi nello stato finale, l'integrale corrispondente andrebbe effettuato in una regione vincolata e questo può essere molto complessa da specificare. In realtà qualunque permutazione delle variabili dà lo stesso contributo alla (11.49), quindi è più semplice sommare sulle variabili *non vincolate* e dividere il risultato per il numero delle permutazioni effettive:

$$P = \frac{n_1!n_2!\dots}{N!} \sum_{\lambda_1\dots} |A_{\lambda_1\dots}|^2 \quad (11.50)$$

Ad esempio se f rappresenta l'ampiezza di probabilità per avere uno stato finale a due particelle di impulso $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$, la probabilità di avere una coppia con qualunque impulso è

$$\frac{1}{2!} \int_{\mathbf{p}_1} \int_{\mathbf{p}_2} |f|^2 \quad (11.51)$$

Il motivo del fattore $1/2$ in questo caso è particolarmente chiaro: effettuando l'integrale non vincolato ogni configurazione finale viene contata due volte, perchè la misura $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ e quella $(\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1)$ sono le stesse, essendo le particelle identiche.

11.4.3 Determinanti di Slater

Analizziamo più in dettaglio il caso fermionico esplicitando la rappresentazione di Schrödinger. Ricordiamo innanzitutto che qualunque sia la rappresentazione, questa è determinata dalla scelta di autostati $|\alpha\rangle$ di un insieme completo e che la funzione d'onda dello stato in tale rappresentazione è

$$\langle\alpha|\psi\rangle \equiv \psi(\alpha) \quad (11.52)$$

Nel caso della rappresentazione di Schrödinger l'insieme delle variabili α è costituito dagli autostati di \mathbf{q} , con autovalori \mathbf{x} , e, ad esempio, dagli autostati di s_z , con autovalori $\pm 1/2$. Quindi la funzione d'onda si presenta nella forma $\psi(\mathbf{x}, \sigma)$, dove σ ha due valori, es. $\pm 1/2$. Logicamente si può anche scrivere $\psi_\sigma(\mathbf{x})$, con $\sigma = 1, 2$ ad indicare i due autovalori di σ_z , ed intendere la funzione d'onda come un vettore a due componenti. Entrambe le scritture sono usate.

Uno stato fermionico ad N particelle sarà quindi descritto da una funzione totalmente antisimmetrica nelle N variabili $\alpha_1, \dots, \alpha_N$, $\psi(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$. Una base per questo insieme di funzioni è, indicando un insieme qualunque di stati ortonormali con $\lambda_1, \dots, \lambda_N$:

$$\varphi_{\lambda_1, \dots, \lambda_N}(\alpha_1, \dots, \alpha_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \epsilon_P \psi_{\lambda_1}(\alpha_1) \dots \psi_{\lambda_N}(\alpha_N) \quad (11.53)$$

Nella (11.53) gli stati sono normalizzati se le funzioni ψ_{λ_i} sono ortonormali. Notiamo che, a piacere, si può operare la permutazione sugli stati o sulle variabili α_i , chiaramente è la stessa cosa.

La formula che compare nella (11.53) non è altro che la definizione di determinante, quindi

$$\varphi_{\lambda_1, \dots, \lambda_N}(\alpha_1, \dots, \alpha_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\lambda_1}(\alpha_1) & \psi_{\lambda_1}(\alpha_2) & \dots & \psi_{\lambda_1}(\alpha_N) \\ \psi_{\lambda_2}(\alpha_1) & \psi_{\lambda_2}(\alpha_2) & \dots & \psi_{\lambda_2}(\alpha_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{\lambda_N}(\alpha_1) & \psi_{\lambda_N}(\alpha_2) & \dots & \psi_{\lambda_N}(\alpha_N) \end{vmatrix} \quad (11.54)$$

Determinanti del tipo (11.54) si chiamano *determinanti di Slater*. Un generico stato è rappresentabile come somma di funzioni del tipo (11.54):

$$\psi(\alpha_1, \dots, \alpha_N) = \sum_{\lambda_1, \dots, \lambda_N} C_{\lambda_1, \dots, \lambda_N} \varphi_{\lambda_1, \dots, \lambda_N}(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$$

Nella forma (11.54) il principio di Pauli è evidente: se due stati sono uguali il determinante ha due righe uguali e quindi si annulla.

11.5 Interferenza quantistica.

In questo paragrafo analizzeremo uno dei fenomeni più peculiari della Meccanica Quantistica, basato su due aspetti basilari della teoria, il principio di sovrapposizione e la statistica delle particelle identiche: l'interferenza delle ampiezze per più particelle identiche.

L'argomento è naturalmente trattato in modo abbastanza dettagliato in tutti i testi di Meccanica Quantistica, ma fra tutti vogliamo segnalare le lezioni di R.P. Feynman[15], che il lettore è invitato a consultare.

Il fenomeno dell'interferenza è già stato incontrato nello studio dei fondamenti stessi della teoria: la discussione della diffrazione di un fascio elettronico attraverso due fenditure è il prototipo dei fenomeni in cui si manifesta il comportamento ondulatorio della materia. Per quanto lontana dalla esperienza quotidiana possa essere l'idea di considerare un elettrone come associato ad un'onda, l'esperienza acquisita con l'interferenza delle onde elettromagnetiche permette di costruirsi almeno un'immagine "ondulatoria" del fenomeno: benchè formalmente inesatto è naturale associare la funzione d'onda di Schrödinger per una particella, $\psi(\mathbf{x})$, ad una analoga grandezza classica per le onde elettromagnetiche, ad esempio il campo elettrico, e usare lo stesso linguaggio per descrivere il fenomeno, parlare quindi di interferenza, diffrazione etc., benchè nel caso quantistico la funzione d'onda sia associata ad una *ampiezza di probabilità* non ad un oggetto materiale.

Analizziamo ora un fenomeno in cui è molto più problematica la raffigurazione classica: l'urto fra due particelle identiche. Cominciamo dallo studio di due particelle distinguibili per chiarire i termini del problema, consideriamo perciò una esperienza come quella di

Rutherford: un fascio di particelle α (nuclei di elio) va a scontrarsi su dei nuclei di un altro materiale, oro nel caso di Rutherford.

Definizioni delle variabili. Ignoriamo per il momento possibili numeri quantici interni. Lo stato iniziale del sistema è allora della forma

$$|\psi_i\rangle = |\mathbf{p}\rangle|\mathbf{q}\rangle \equiv |\mathbf{p}, \mathbf{q}\rangle \quad (11.55)$$

Da ora in poi sciveremo sempre al primo posto l'impulso della particella 1, al secondo posto quello della particella 2.

Il sistema evolve, avviene una diffusione e lo stato finale del sistema è

$$|\psi_f\rangle = U|\psi_i\rangle \quad (11.56)$$

U è l'operatore di evoluzione temporale $U(T, -T)$, con $T \rightarrow \infty$, e descrive la "storia" dello stato da una situazione non interagente iniziale (i fasci entranti di particelle) ad una non interagente finale (le particelle diffuse). Le misure sono fatte sullo stato $|\psi_f\rangle$. Nel processo di evoluzione si conserva l'energia e l'impulso totale del sistema, possiamo quindi pensare al processo direttamente nel centro di massa, in questo caso le due particelle hanno impulsi iniziali opposti. Gli stati finali permessi dalla legge di conservazione hanno anch'essi impulsi opposti, quindi gli unici elementi di matrice che ci interessano sono della forma

$$\langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | \psi_f \rangle = \langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle \quad (11.57)$$

Nello stato finale le particelle sono di nuovo libere, quindi l'energia è ancora quella iniziale ed è la somma delle energie cinetiche delle particelle. Questo significa che il modulo di \mathbf{p}' è fissato e l'elemento di matrice (11.57) dipende solo dalla direzione di \mathbf{p}' . Se, come supporremo, il sistema ha simetria assiale, non c'è dipendenza dall'angolo azimutale e l'elemento di matrice (11.57) dipende solo dall'angolo di diffusione θ . Chiameremo *ampiezza di diffusione* tale elemento di matrice e lo indicheremo con $f(\theta)$, θ è l'angolo fra \mathbf{p} e \mathbf{p}' :

$$f(\theta) = \langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle \quad (11.58)$$

Definizione delle osservabili. Il rivelatore può essere di due tipi: può distinguere o no il tipo di particella. Consideriamo il primo caso. L'operazione di misura, ad esempio della particella 1, è descritta da

$$|\mathbf{p}'\rangle_{11}\langle \mathbf{p}'| \sum_{\mathbf{q}'} |\mathbf{q}'\rangle_{22}\langle \mathbf{q}'| \equiv \sum_{\mathbf{q}'} |\mathbf{p}', \mathbf{q}'\rangle \langle \mathbf{p}', \mathbf{q}'| \quad (11.59)$$

Nella (11.59) è esplicitamente scritto che non si osserva l'impulso della seconda particella. In effetti però la conservazione dell'impulso implica che fra tutti gli stati possibili solo quelli con $\mathbf{q}' = -\mathbf{p}'$ si possono realizzare, quindi l'operatore di misura si riduce a

$$\mathcal{M}_1 = |\mathbf{p}', -\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}'| \quad (11.60)$$

In realtà anche il modulo dell'impulso è fissato, ma per non appesantire la notazione lasciamo la (11.60) in questa forma. La misura della particella 2 con impulso \mathbf{p}' si ottiene dalla (11.60) scambiando di posto i due vettori:

$$\mathcal{M}_2 = \sum_{\mathbf{q}'} |\mathbf{q}', \mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{q}', \mathbf{p}'| = |-\mathbf{p}', \mathbf{p}'\rangle \langle -\mathbf{p}', \mathbf{p}'| \quad (11.61)$$

Chiariamo il senso operativo delle due misure: si pone un rivelatore ad un certo angolo θ dal fascio e si fa il conteggio delle particelle. La misura \mathcal{M}_1 significa che si rivela una

particella di tipo 1, la misura \mathcal{M}_2 è effettuata col rivelatore nella stessa posizione ma in questo caso si seleziona la, eventuale, particella di tipo 2.

Se il rivelatore non distingue le due particelle si misurerà logicamente:

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_2 = |\mathbf{p}', -\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}', -\mathbf{p}'| + |-\mathbf{p}', \mathbf{p}'\rangle\langle-\mathbf{p}', \mathbf{p}'| \quad (11.62)$$

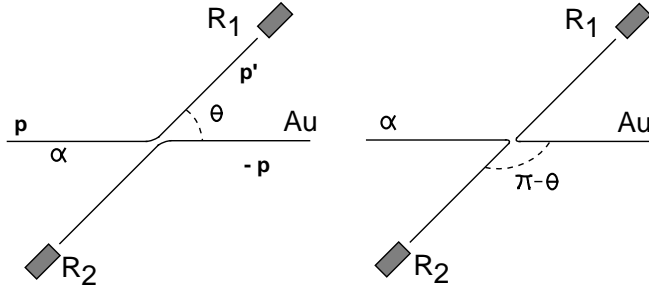


Figura 11.1: Urto di una particella α con un nucleo.

Risultato per particelle distinguibili. Abbiamo ora tutti gli elementi per descrivere il risultato della misura nel caso di urto tra particelle α e nucleo. La densità di probabilità⁵ di osservare la particella α diffusa ad angolo θ sarà

$$\langle\psi_f|\mathcal{M}_1|\psi_f\rangle = |\langle\mathbf{p}', -\mathbf{p}'|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle|^2 = |f(\theta)|^2 \quad (11.63)$$

La probabilità di osservare una *qualunque* particella è

$$\langle\psi_f|\mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_2|\psi_f\rangle = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.64)$$

Il secondo termine è dovuto al fatto che, secondo la definizione (11.58), θ è l'angolo fra \mathbf{p} e \mathbf{p}' , quindi l'angolo fra \mathbf{p} e $-\mathbf{p}'$ è $\pi - \theta$.

Per quanto abbiamo detto precedentemente la (11.64) ha anche un'altra interpretazione: siccome misurare la seconda particella è la stessa cosa che misurare la prima ad angolo $\pi - \theta$ stiamo affermando che la probabilità di misurare la particella α ad angolo θ oppure ad angolo $\pi - \theta$ è la somma delle due probabilità.

11.5.1 Particelle indistinguibili: bosoni.

Consideriamo ora il caso di un urto fra due particelle α .

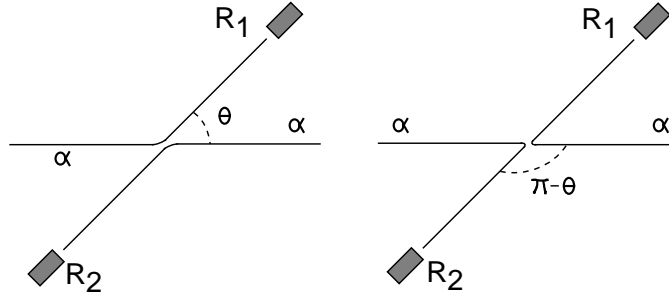
Per particelle di spin 0 lo stato iniziale è uno stato *simmetrico*, quindi della forma

$$|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle + |-\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle\} \quad (11.65)$$

Non solo: i soli stati osservabili sono quelli simmetrici, quindi l'operazione di misura **non** è data dal proiettore (11.60) ma da

$$|\mathbf{p}', -\mathbf{p}'\rangle_S \langle\mathbf{p}', -\mathbf{p}'| \quad (11.66)$$

⁵Prescindiamo qui dalla questione di normalizzazione degli stati, parliamo per brevità di probabilità anche se ciò che scriviamo è in realtà solo proporzionale alla probabilità del processo per unità di tempo.

Figura 11.2: Urto di due particella α .

La probabilità dell'evento, misura di una particella α ad angolo θ è allora:

$$\begin{aligned}
 P(\theta) &= |{}_S\langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle_S|^2 \\
 {}_S\langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle_S &= \frac{1}{2} \left\{ 2\langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle + 2\langle -\mathbf{p}', \mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle \right\} = \\
 &= f(\theta) + f(\pi - \theta)
 \end{aligned} \tag{11.67}$$

Quindi

$$\boxed{P(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2} \tag{11.68}$$

Questo risultato è *completamente diverso* da quello per particelle distinguibili, (11.64): è presente un termine di *interferenza fra le ampiezze*. Commentiamo questo risultato formale.

Con riferimento alla figura 11.2 il fatto che il rivelatore R_1 , posto ad angolo θ dal fascio misuri **una particella** α si esprime con

$$\begin{aligned}
 \mathcal{M} &= \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{p}', \mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{p}', \mathbf{q}| + \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{q}, \mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{q}, \mathbf{p}'| = \\
 &= |\mathbf{p}', -\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}'| + |-\mathbf{p}', \mathbf{p}'\rangle \langle -\mathbf{p}', \mathbf{p}'|
 \end{aligned} \tag{11.69}$$

cioè l'operatore (11.62), infatti il rivelatore non distingue la particella 1 dalla particella 2, in quanto appunto le particelle sono identiche. Formalmente questo operatore è diverso dal proiettore (11.66), ma coincide con questo sugli stati simmetrici, infatti

$$\langle \psi_f | \mathcal{M} | \psi_f \rangle = 2 |\langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | \psi_f \rangle|^2 = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \tag{11.70}$$

Questo è un esempio della relazione (11.45) e ne chiarisce il significato fisico.

Punto fondamentale: Le due possibilità illustrate nella figura 11.2, e nelle seguenti, *non vanno intese come probabilità, ma come ampiezze*. Non si hanno due possibilità con probabilità diverse che si sommano, si hanno invece due *ampiezze* che vanno sommate. Questo è un concetto cruciale ed è il punto discriminante fra la meccanica classica e quella quantistica: il fatto che il rivelatore R_1 possa misurare la particella 1 o la particella 2 non corrisponde alla somma dei risultati di due misure diverse, è invece un modo di analizzare una singola misura in termini di componenti più semplici (non simmetrizzate) dello stato.

Alla (11.68) è quindi possibile associare una descrizione intuitiva basata sulla evoluzione temporale dello stato, che si perde un pò nella descrizione che abbiamo fatto in termini di autostati degli impulsi. All'istante iniziale le particelle sono separate, quindi la simmetrizzazione o meno dello stato non deve avere influenza, questo corrisponde fisicamente al fatto che le particelle sono in realtà descritte da pacchetti d'onda con una certa localizzazione spaziale, non da onde piane come nelle equazioni (11.65) e seguenti. Nel corso dell'evoluzione temporale i due pacchetti si sovrappongono e si ha una diffusione, di nuovo in due pacchetti separati. Ma il fatto che le particelle siano identiche significa che, per una

data configurazione finale, l'ampiezza di probabilità è data dalla somma di due ampiezze, appunto perchè le due situazioni in cui le particelle finali 1 e 2 sono scambiate è indistinguibile. In altre parole per una data condizione finale ci sono due ampiezze possibili, $f(\theta)$ e $f(\pi - \theta)$ che corrispondono alla stessa situazione fisica. La differenza cruciale fra meccanica classica e meccanica quantistica è che in meccanica quantistica *non si sommano le probabilità ma le ampiezze*. Dal punto di vista formale questa proprietà è riflessa dal fatto che lo stato iniziale (e finale) che abbiamo usato sono una *sovrapposizione* di due stati fattorizzati.

Naturalmente l'osservazione sperimentale conferma il risultato (11.68). Notiamo in particolare che per $\theta = \pi/2$, nel centro di massa del sistema, la probabilità predetta è il doppio rispetto a quella "classica". Prima di discutere più approfonditamente le implicazioni della (11.68) analizziamo il caso fermionico.

11.5.2 Particelle indistinguibili: fermioni.

Nel caso fermionico si deve avere antisimmetria rispetto allo scambio di *tutte* le variabili, orbitali e di spin. Consideriamo due elettroni, quindi il caso di spin 1/2. Ogni particella ha due valori possibili per la proiezione s_z dello spin, quindi per dati impulsi incidenti ci sono 4 possibili stati di spin per la coppia (e 4 possibili stati di spin per la coppia uscente)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle - |-\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle) |+, +\rangle \quad (11.71a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle - |-\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle) |-, -\rangle \quad (11.71b)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle |+, -\rangle - |-\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle |-, +\rangle) \quad (11.71c)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle |-, +\rangle - |-\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle |+, -\rangle) \quad (11.71d)$$

Notando che due spin 1/2 si possono sommare in modo simmetrico per dare uno spin 1, stato di *tripletto*, o in modo antisimmetrico per dare uno spin 0, stato di *singoletto*:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle) \quad |1, 1\rangle = |+\rangle|+\rangle \quad |1, -1\rangle = |-\rangle|-\rangle$$

si possono usare anche le combinazioni:

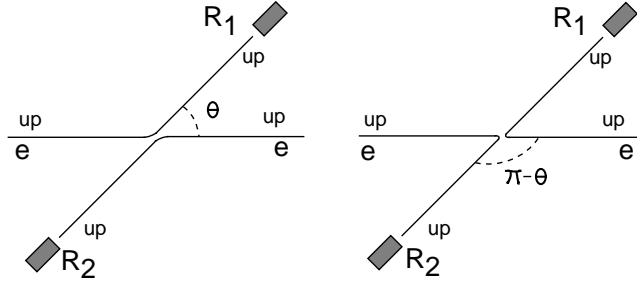
$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle + |-\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle) |S\rangle \equiv |\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle_S |S\rangle \quad (11.72a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle - |-\mathbf{p}, \mathbf{p}\rangle) |T\rangle \equiv |\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle_A |T\rangle \quad (11.72b)$$

Ma per il discorso che segue preferiamo usare la base (11.71).

La situazione generale è piuttosto complicata, dipende se nell'urto lo spin è o no conservato, dipende da cosa si misura etc. Analizziamo il caso più semplice, ed interessante, rimandando al paragrafo ?? una piccola estensione formale dei risultati.

Supponiamo che l'interazione *non dipenda dallo spin* e che il rivelatore *non distingua lo spin*. La cosa è interessante perchè in un certo senso lo spin è "invisibile" sia all'interazione che al rivelatore. Supponiamo che i due elettroni iniziali abbiano lo stesso valore di s_z , quindi entrambi "up" o entrambi "down", scriveremo u, d al posto di $+, -$ in alcune formule per renderle più chiare.

Figura 11.3: Urto di due elettroni con lo stesso s_z .

Se i due elettroni hanno spin entrambi +, o -, sono a tutti gli effetti particelle identiche e si ha per l'ampiezza di diffusione

$${}_A\langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle_A = f(\theta) - f(\pi - \theta) \quad (11.73)$$

e la corrispondente probabilità

$$P_{uu,uu}(\theta) = P_{dd,dd}(\theta) = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.74)$$

Il risultato è diverso da quello classico e diverso da quello bosonico naturalmente. In particolare in questo caso ad un angolo $\theta = \pi/2$, nel centro di massa, l'interferenza è distruttiva.

Chiariamo alcune cose. Riferendoci alla situazione rappresentata in figura 11.3, l'operatore che esprime il conteggio di un elettrone nel rivelatore R_1 , quindi con impulso \mathbf{p}' , e non misura lo spin è, tenendo conto della conservazione dell'impulso:

$$\mathcal{M}_1 = \sum_{s_z, s'_z} \left\{ |\mathbf{p}', -\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | s_z, s'_z \rangle \langle s_z, s'_z | + |-\mathbf{p}', \mathbf{p}'\rangle \langle -\mathbf{p}', \mathbf{p}' | s_z, s'_z \rangle \langle s_z, s'_z | \right\} \quad (11.75)$$

Se assumiamo che l'interazione conservi lo spin, e se partiamo da una configurazione (+, +), o (-, -), solo la corrispondente combinazione di spin nella (11.75) sopravvive, e possiamo "dimenticarci" della variabile di spin. Ricaviamo quindi la (11.74) esattamente come nel caso bosonico:

$$\langle \psi_f | \mathcal{M}_1 | \psi_f \rangle = 2 |\langle \mathbf{p}', -\mathbf{p}' | U | \mathbf{p}, -\mathbf{p} \rangle_A|^2 = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.76)$$

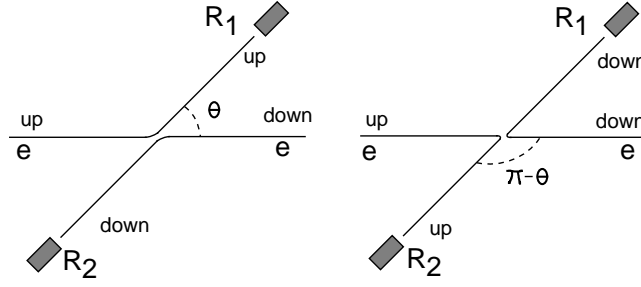
Supponiamo che lo spin sia opposto, ad esempio +, -. Le due particelle si devono comportare come se fossero distinguibili, appunto perchè sono in stati diversi, ed il principio di Pauli non entra in gioco. Se non si misura lo spin il rivelatore posto ad un angolo θ può rivelare sia il primo elettrone con lo spin +, e questo corrisponde ad una probabilità $|f(\theta)|^2$, o il secondo con lo spin in giù, e questo corrisponde ad una probabilità $|f(\pi - \theta)|^2$, come nel caso bosonico, quindi si deve osservare

$$P_{ud,ud} = |f(\theta)|^2 \quad P_{ud,du} = |f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.77a)$$

$$P_{ud,X}(\theta) \equiv P_{ud,ud} + P_{ud,du} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.77b)$$

Si usa generalmente la notazione $a + b \rightarrow X$ per indicare una transizione in uno stato finale qualunque, qui i due possibili stati di spin opposto.

Facciamo anche in questo caso un'analisi dettagliata dell'operazione di misura. Per generalità supponiamo che il rivelatore R_2 possa misurare lo spin, l'impulso è automaticamente misurato.

Figura 11.4: Urto di due elettroni con s_z opposto.

La misura di un elettrone + nel rivelatore R_1 , cioè ad angolo θ , e di un elettrone – nel rivelatore R_2 è data dal valor medio di:

$$\mathcal{M}_{ud,ud} = |\mathbf{p}', -\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}', -\mathbf{p}'||+, -\rangle\langle+, -| + |-\mathbf{p}', +\mathbf{p}'\rangle\langle-\mathbf{p}', +\mathbf{p}'||-, +\rangle\langle-, +| \quad (11.78)$$

Notiamo la simmetrizzazione: i due elettroni sono identici, quindi l'elettrone misurato in R_1 può essere la particella 1 o la particella 2. Si ha, usando la solita proprietà di simmetria:

$$\langle\psi_f|\mathcal{M}_{ud,ud}|\psi_f\rangle = 2|\langle+, -|\langle\mathbf{p}', -\mathbf{p}'|U(|\mathbf{p}, -\mathbf{p}\rangle|+, -)\rangle_A|^2 \quad (11.79)$$

L'ampiezza è, separando la parte di spin dalla parte orbitale,

$$\langle u, d|\mathcal{A}|u, d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle+, -|+, -\rangle f(\theta) + \langle+, -|-, +\rangle f(\pi - \theta)) = \frac{1}{\sqrt{2}}f(\theta) \quad (11.80)$$

Inserendo questo risultato nella (11.79) segue l'espressione per $P_{ud,ud}$ data dalla (11.77a). Una cosa, ovvia dall'impostazione, ma importante dal punto di vista di principio, è che l'ampiezza $\langle u, u|\mathcal{A}|u, d\rangle$ è nulla, per l'ortogonalità degli stati di spin, questo ci dice due cose importanti: si sarebbe ottenuta la stessa ampiezza anche se **non si fosse osservato** lo spin in R_2 , in effetti l'altra ampiezza possibile, $\langle u, u|\mathcal{A}|u, d\rangle$ appunto, è nulla.

Logicamente si possono anche calcolare l'ampiezza e la probabilità per misurare uno spin – in R_1 , ed ormai dovrebbe essere chiaro come riottenere in modo formale il risultato (11.77a) scritto “a colpo” poche righe sopra:

$$\langle d, u|\mathcal{A}|u, d\rangle = f(\pi - \theta) \quad P_{ud,du} = |f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.81)$$

Una conseguenza importante delle formule precedenti è la seguente: se si parte da uno stato (u, d) e si misura lo spin in R_1 **automaticamente** viene fissato lo spin in R_2 . Questo sembra praticamente una banalità: se si hanno 2 particelle, tipo u,d, se in un rivelatore si misura la prima, nell'altro si deve misurare la seconda, vedremo che la situazione è un pò più delicata. Per ora sottolineiamo il fatto che in R_1 a priori è possibile misurare sia la particella u che quella d , la scelta avviene solo *dopo* aver fatto la misura, questo, automaticamente, implica il risultato della misura su R_2 , che può essere un rivelatore posto a distanza arbitrariamente grande da R_1 .

Finora abbiamo trattato stati puri, ma possiamo anche pensare di avere dei fasci di elettroni non preselezionati in spin, quindi descritti da una matrice statistica, ogni elettrone avrà il 50% di probabilità di avere lo spin + ed il 50% di probabilità di avere lo spin –. ognuna delle 4 configurazioni possibili allora ha probabilità 1/4: è un urto fra fasci non polarizzati. La misura darà la media pesata dei risultati precedenti, che sono riassunti nella tabella seguente

prob.	spin part 1	spin part. 2	spin R_1	spin R_2	Probabilità
$\frac{1}{4}$	u	u	u	u	$ f(\theta) - f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	d	d	d	d	$ f(\theta) - f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	u	d	$\left\{ \begin{array}{l} u \\ d \end{array} \right.$	d	$ f(\theta) ^2$
				u	$ f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	d	u	$\left\{ \begin{array}{l} u \\ d \end{array} \right.$	d	$ f(\pi - \theta) ^2$
				u	$ f(\theta) ^2$

Quindi per un fascio non polarizzato la probabilità è data da

$$P = \frac{1}{2}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{2}|f(\theta)|^2 + \frac{1}{2}|f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.82)$$

Anche questo è un risultato molto interessante: per un fascio non polarizzato, usando rivelatori “ciechi” allo spin, il risultato **non è uguale** al risultato che si otterrebbe per particelle distinguibili, lo spin si manifesta indirettamente con la nascita di un termine di interferenza.

11.6 Discussione sull'interferenza.

In meccanica classica la distinzione fra due corpi, in particolare due particelle, è basata su dei parametri che possono, in linea di principio, cambiare con continuità: ad esempio due sfere omogenee di raggio quasi uguale e massa quasi uguale sono considerate “quasi identiche”. A prima vista sembra che questo tipo di descrizione venga meno in Meccanica Quantistica, infatti le ampiezze (11.64) e (11.68) sono molto differenti, nella seconda è presente un termine di interferenza nella prima no. Un breve ragionamento permette però di ripristinare questa continuità rispetto ai parametri: immaginiamo di avere due particelle quasi uguali, nel senso che con gli strumenti di misura a disposizione non riusciamo a distinguerle, nè in fase di preparazione nè in fase di rivelazione, chiamiamo a, b le due particelle, che supporremo di spin nullo. Ci sono 4 tipi di stati, (a, a) , (b, b) , (a, b) , (b, a) , nei primi due le particelle sono effettivamente identiche. Se nella preparazione non si distinguono i tipi lo stato iniziale può essere assunto come una miscela statistica con pesi uguali per le quattro combinazioni precedenti, abbiamo allora la seguente tabella per le probabilità di transizione, identica a quella di due elettroni, a meno del segno per i termini di interferenza:

prob.	part 1	part 2	Riv. 1	Riv. 2	Probabilità
$\frac{1}{4}$	a	a	a	a	$ f(\theta) + f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	b	b	b	b	$ f(\theta) + f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	a	b	$\left\{ \begin{array}{l} a \\ b \end{array} \right.$	b	$ f(\theta) ^2$
				a	$ f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	b	a	$\left\{ \begin{array}{l} a \\ b \end{array} \right.$	b	$ f(\pi - \theta) ^2$
				a	$ f(\theta) ^2$

Ne segue una probabilità di transizione

$$P = \frac{1}{2}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{2}|f(\theta)|^2 + \frac{1}{2}|f(\pi - \theta)|^2 \quad (11.83)$$

che è logicamente uguale a quella che si otterrebbe per una particella singola con due stati interni a, b . In questo senso due particelle ‘simili’ possono essere identificate con una singola particella avente due stati interni diversi.

Viceversa il fatto di misurare, ad esempio attraverso un processo d’urto elettromagnetico, una ampiezza di diffusione del tipo (11.68) ci dice che una particella α **non ha** una struttura interna degenere: la sua massa ed il suo spin identificano univocamente il tipo di particella. Questa piccola introduzione ci conduce al problema che vogliamo discutere in questo paragrafo: nel principio di simmetrizzazione si fissa un certo tipo di statistica per particelle elementari, ma cosa è che si deve intendere per particella elementare?

Le particelle α in realtà sono oggetti composti, costituiti da due protoni e due neutroni. Se effettuiamo un processo d’urto a grande energia possiamo far sì che i costituenti stessi vengano scambiati fra una particella e l’altra, o che ci sia un processo di frammentazione in cui lo stato finale è composto da nucleoni liberi, in questo caso è chiaro che la statistica in gioco è quella dei costituenti. L’interazione fra i due oggetti composti è in ultima analisi riconducibile ad una Hamiltoniana di interazione fra i costituenti, fra nucleoni nel caso di particelle α . Supponiamo di considerare una diffusione fra due composti, a, b nello stato fondamentale. Gli elementi di matrice dell’Hamiltoniana, una volta operata la simmetrizzazione sugli stati, possono essere divisi in due gruppi: quelli che coinvolgono uno scambio fra i componenti e quelli che invece lasciano invariati i composti. Se gli elementi di matrice si scambio sono trascurabili allora i composti possono essere trattati come un’unica particella. Il termine di confronto per affermare la trascurabilità o meno di questi elementi di matrice è dato dalla differenza di energia fra lo stato fondamentale e gli stati eccitati:

$$\frac{V_{scambio}}{\Delta E} \ll 1 \quad (11.84)$$

La relazione (11.84) ha un significato piuttosto intuitivo: se il primo stato eccitato è molto diverso dal fondamentale, semplicemente non viene coinvolto dall’interazione. Si può dare una giustificazione formale della (11.84) usando la teoria delle perturbazioni, vedi ad esempio la ref.[16]. È chiaro ora che le permutazioni che non coinvolgono scambio fra le componenti sono di due tipi: o sono all’interno di ogni composto, e allora determinano solo la struttura interna della particella, o coinvolgono uno scambio in blocco dei composti, e corrisponderanno a scambi di particelle bosoniche o fermioniche a seconda del tipo di componenti.

- 1) Se le componenti sono bosoniche questi scambi devono lasciare invariata la funzione d’onda del sistema.
- 2) Se le componenti sono fermioniche, ed in numero pari, questi scambi devono lasciare invariata la funzione d’onda del sistema.
- 3) Se le componenti sono fermioniche, ed in numero dispari, questi scambi devono fra cambiare segno alla funzione d’onda del sistema, cioè lo stato deve essere dispari.

In altre parole, parlando di componenti fermioniche, che è il caso realistico: un numero pari di fermioni si comporta come un bosone, infatti ha uno spin totale intero, un numero dispari come un fermione, infatti ha uno spin totale semintero.

Una tipica situazione che riflette questo stato di cose è quella di un nucleo all’interno di una struttura molecolare. Le interazioni in gioco sono quelle elettromagnetiche a bassa energia, quindi frazioni di eV al massimo. La probabilità di “eccitare” gli stati interni nucleari, con una separazione tipica di qualche MeV è assolutamente trascurabile e a tutti gli effetti i nuclei possono essere considerati come particelle elementari con un dato spin.

È interessante notare che questo tipo di considerazioni hanno fornito una delle prime prove a favore del modello di nucleo come composto da Z protoni e $A - Z$ neutroni. Si pensava che un nucleo di carica Z e peso atomico A potesse essere costituito da A protoni e $A - Z$ elettroni, che in pratica

contribuiscono alla carica ma sono trascurabili come massa. Se consideriamo l'azoto, con carica 7 e numero atomico 14, N_7^{14} , i due modelli prevedono:

$$\begin{array}{ll} 7 \text{ protoni} + 7 \text{ neutroni} & 14 \text{ fermioni} \Rightarrow \text{bosone} \\ 14 \text{ protoni} + 7 \text{ elettroni} & 21 \text{ fermioni} \Rightarrow \text{fermione} \end{array}$$

Se si considera una molecola di azoto, N_2 , gli stati orbitali permessi per il moto dei nuclei cambiano a seconda della natura fermionica o bosonica dei nuclei stessi. Dall'analisi dei livelli rotazionali della molecola di N_2 si può ricavare che il nucleo di azoto ha spin intero, escludendo quindi il modello che prevedeva la presenza di elettroni come costituenti nucleari. Il lettore interessato può trovare una breve disamina del problema in appendice ??.

Quanto abbiamo detto può riassumersi in questo modo. Consideriamo l'Hamiltoniana di un sistema isolato con N componenti. L'invarianza sotto traslazioni permette di affermare che, passando alle coordinate relative, il moto del centro di massa del sistema è disaccoppiato, cioè l'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari ha delle soluzioni del tipo

$$\Psi = \Psi(\mathbf{X}_{cm})\varphi(\xi) \sim \exp(i\mathbf{P}\mathbf{X}_{cm})\varphi(\xi)$$

esattamente come nel caso dell'atomo di idrogeno. ξ rappresenta simbolicamente l'insieme delle coordinate relative. L'invarianza sotto rotazioni impone che il momento angolare nel sistema del centro di massa, cioè lo spin, sia un buon numero quantico. Quindi fra i numeri quantici che descrivono lo stato del sistema bisogna annoverare S, S_z , quindi le autofunzioni per gli stati stazionari sono della forma

$$\varphi(\xi) = \varphi_{S, S_z, n}(\xi) \tag{11.85}$$

dove n è l'insieme degli altri numeri quantici. Per interazioni piccole rispetto alle differenze di energie dei livelli interni, i numeri quantici S, S_z, n non cambiano e a tutti gli effetti il composto si comporta come una particella di impulso \mathbf{P} e spin S . Questa sarà la nostra definizione operativa di "particella elementare": un sistema in cui un insieme completo di osservabili è costituito dall'impulso e dallo spin (e dalla massa). Dal punto di vista geometrico questa definizione è molto naturale: si sta sempre assumendo che un qualunque sistema fisico sia invariante sotto il gruppo di Galileo, quindi lo spazio di Hilbert del sistema deve essere sede di una rappresentazione del gruppo. Questa rappresentazione sarà decomponibile in rappresentazioni irriducibili, che sono appunto le rappresentazioni più "elementari". Queste rappresentazioni sono caratterizzate dalla massa e dallo spin⁶.

Una lezione che si trae da questo discorso è che in certe situazioni il concetto di particella elementare dipende dalla cinematica. Come esempio concreto consideriamo la diffusione di un elettrone da un atomo di idrogeno nello stato fondamentale. Si hanno diverse regioni cinematiche:

- 1) Diffusione a bassissima energia: le funzioni d'onda dell'elettrone incidente e dell'elettrone legato hanno una notevole sovrapposizione, gli effetti di scambio non possono essere trascurati, in più si può avere un passaggio dell'atomo ad un livello eccitato, cioè una diffusione anelastica, in cui evidentemente l'atomo in quanto tale non può essere considerato come un oggetto singolo.
- 2) Diffusione elastica ad alta energia. Nella diffusione elastica la struttura atomica non viene cambiata. Poiché l'energia dell'elettrone incidente è alta rispetto alle tipiche energie atomiche la sovrapposizione fra le funzioni d'onda dei due elettroni, quello incidente e quello legato, sono trascurabili. L'atomo è visto come un unico oggetto con una certa distribuzione di carica, il fattore di forma, e gli effetti di scambio sono trascurabili.

⁶Per essere precisi ciò che si richiede alla teoria è l'invarianza rispetto a trasformazioni relativistiche, il gruppo corrispondente è il gruppo di Poincaré, e gli invarianti di questo gruppo che caratterizzano le rappresentazioni irriducibili, per massa non nulla, sono appunto la massa e lo spin. Il gruppo di Galileo è visto come il limite non relativistico di questa costruzione.

- 3) Diffusione inelastica con ionizzazione dell'atomo. Nello stato finale sono presenti due elettroni, quindi gli effetti di scambio sono sicuramente importanti, ma la loro importanza dipende dalla regione cinematica in esame, dipende cioè da quanto le funzioni d'onda degli elettroni finali sono sovrapposte.

Come si vede lo stesso oggetto, un atomo, si comporta come un'unica particella o come un composto a seconda del tipo di processo.

In linea di principio se si conoscono le componenti si può sempre descrivere lo stato del sistema usando la loro statistica, ma questo può non essere molto conveniente, si pensi alla diffusione di particelle α a bassa energia.

Non bisogna pensare che questo tipo di discorso sia limitato a nuclei ed elettroni, vale per *qualunque* sistema. Un esempio illuminante è fornito dal comportamento superfluido dell'elio. Un atomo di elio è costituito da un nucleo di spin zero (una particella α) e due elettroni in un guscio elettronico chiamato $1s^2$. Lo spin totale del sistema è nullo e l'atomo è quindi un bosone. Il primo stato eccitato corrisponde ad una configurazione elettronica $1s2s$, nel linguaggio degli orbitali dell'idrogeno, ed ha una differenza di energia di circa 19.8 eV. Quindi in condizioni normali di temperatura e pressione l'atomo è nello stato fondamentale. A temperatura sufficientemente bassa l'elio è liquido. Al contrario di altri materiali l'elio non solidifica abbassando la temperatura, questo permette una rilevante sovrapposizione delle funzioni d'onda dei singoli atomi, quindi gli effetti della statistica di Bose sono importanti e si ha un fenomeno di "condensazione quantistica", che corrisponde macroscopicamente allo stato superfluido. Viceversa l'isotopo He_3 , in cui il nucleo è formato da due protoni ed un solo neutrone, è un fermione e non presenta fenomeni di condensazione, tipici della statistica di Bose. Sottolineiamo che è l'*atomo* che condensa, non il nucleo: l'intero atomo si comporta come un sistema elementare.

Un altro esempio può essere il fenomeno di condensazione di Bose per un atomo di idrogeno. Trascuriamo per semplicità la possibilità di formare molecole. Consideriamo un gas rarefatto di idrogeno, confinato in qualche modo in una regione limitata dello spazio in modo che a bassa temperatura, quindi piccola velocità e grande lunghezza di de Broglie, si possa avere una sovrapposizione notevole delle funzioni d'onda: anche in questo caso si può avere un fenomeno di condensazione. Nell'atomo di idrogeno però lo spin del nucleo (un protone) è $1/2$, come quello dell'elettrone. Il sistema in totale può avere spin 0 o spin 1, i due valori dello spin totale corrispondono a due distinti livelli atomici, i livelli di struttura iperfine, la loro separazione è di circa $\Delta E \sim 5.88 \cdot 10^{-6}$ eV corrispondenti ad una temperatura $T_0 = \Delta E/k \sim 0.06$ K. Per temperature più basse di T_0 si può assumere che il gas sia composto dal solo stato fondamentale e presenti un fenomeno di condensazione. Per temperatura più alta, ma sempre dell'ordine di T_0 si può considerare il sistema come un insieme di due gas di Bose interagenti, uno relativo a $S = 0$, uno relativo a $S = 1$. Notiamo che in questo caso l'Hamiltoniana di interazione deve prevedere la possibilità di trasformazione di un gas nell'altro, ad esempio tramite un urto fra un atomo e l'altro. Questo è un esempio in cui chiaramente conviene preservare una descrizione elementare per i sistemi composti e non analizzarli nelle loro componenti.

11.7 Simmetrie orbitali e di spin.

In molti problemi, soprattutto in fisica atomica, si presenta la seguente situazione: in prima approssimazione l'Hamiltoniana del sistema non dipende dallo spin delle particelle, questo significa che le sue autofunzioni hanno una forma fattorizzata, prodotto di una parte spinoriale e di una parte orbitale:

$$\psi = \chi \cdot \varphi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (11.86)$$

È importante capire come il principio di Pauli, ovvero l'antisimmetria, vincola la forma delle funzioni d'onda, questo ad esempio ci permetterà una classificazione dei livelli atomici.

Il principio di Pauli assicura che la funzione d'onda (11.86) è antisimmetrica per scambio di **tutte** le coordinate, sia quelle orbitali che quelle di spin, ma non fornisce direttamente informazioni separate sulla parte di spin χ e quella orbitale φ .

L'Hamiltoniana H è simmetrica rispetto alle variabili orbitali, non dipendendo dallo spin, quindi commuta con le permutazioni \tilde{P} di queste variabili. Poichè in generale in gruppo delle permutazioni non è abeliano non è possibile diagonalizzare simultaneamente tutte le permutazioni assieme all'Hamiltoniana del sistema. Comunque le cose vanno come nel caso generale delineato nei paragrafi precedenti: lo spazio di Hilbert generato dagli autovettori di H è sede di una rappresentazione del gruppo delle permutazioni (spaziali) S_N , la decomposizione è riducibile ed il lemma di Schür assicura che all'interno di ogni rappresentazione irriducibile H è proporzionale all'identità, in altre parole all'interno di una rappresentazione irriducibile H è diagonalizzata e la dimensione della rappresentazione dà la degenerazione del livello. A priori tutte le rappresentazioni sono possibili. Supponiamo di scrivere l'Hamiltoniana nella forma

$$H = \sum_{i=1}^N H_i^{(1)} + V \equiv H_0 + V \quad (11.87)$$

dove l'operatore $H^{(i)}$ si riferisce solo alla particella i -esima, per un atomo è la somma dell'energia cinetica e dell'energia potenziale nel campo del nucleo. V rappresenta l'interazione fra le particelle.

Se pensiamo di trattare la (11.87) in modo perturbativo dobbiamo elencare gli autostati di H_0 . H_0 è chiaramente a variabili separabili e un suo autostato sarà della forma

$$\psi_{\lambda_1}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{\lambda_N}(\mathbf{x}_N) \quad E = \lambda_1 + \dots + \lambda_N$$

Ora se ψ_0 è un autostato anche $P\psi_0$ lo è, e, siccome H_0 è a variabili separabili, $P\psi_0$ ha lo stesso autovalore, cioè il livello ha una degenerazione almeno $N!$, supponendo che i singoli autovalori λ_i siano non degeneri⁷.

L'interazione V provvederà a rompere parzialmente questa enorme degenerazione ma gli stati sarebbero in ogni caso moltissimi, in effetti il principio di Pauli provvede a limitare drasticamente il numero di stati ammissibili.

Gli $N!$ stati virtualmente possibili sono ottenuti dall'azione del gruppo S_N su un singolo stato, costituiscono perciò, come già visto, una rappresentazione regolare di S_N , che appunto ha dimensione $N!$. Ogni rappresentazione irriducibile corrisponde ad uno schema di Young, quindi i vari livelli sono classificati dai tableaux di Young: il principio di Pauli deve limitare i tableaux possibili.

Consideriamo la parte di spin della funzione d'onda, che benchè non intervenga direttamente nella determinazione dell'autovalore dell'energia, determina la simmetria globale della funzione d'onda. Possiamo analizzare la funzione d'onda di spin di nuovo tramite il gruppo delle permutazioni delle sue variabili, questa avrà i suoi tableaux di Young, cioè le sue simmetrie. Il punto essenziale, che non dimostriamo, è il seguente:

Dualità: Se si vuole che la funzione d'onda totale sia antisimmetrica i tableaux di Young della parte orbitale e di spin devono essere duali l'uno dell'altro, cioè si devono ottenere l'uno dall'altro scambiando le righe con le colonne.

Questo significa che se classifichiamo la parte di spin abbiamo automaticamente classificato anche la parte orbitale. Prima di proseguire richiamiamo brevemente alcune cose sulle rappresentazioni spinoriali.

⁷Il lettore si convince facilmente che questa degenerazione corrisponde a permutare in tutti i modi possibili la sequenza $(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$.

11.7.1 Spinori simmetrici.

La costruzione di rappresentazioni spinoriali avviene in modo esattamente parallelo a quanto fatto per la costruzione di $\mathcal{H}^{(N)}$ in termini di \mathcal{H} , in realtà ne è un caso particolare.

Un singolo spinore può essere rappresentato, come detto, da una funzione $\chi(\sigma)$ in cui la variabile σ assume due valori, corrispondenti, ad esempio, agli autovalori $\pm 1/2$ di s_z , dove z indica la direzione di quantizzazione. Un altro modo di dire la stessa cosa è scrivere χ^σ . Per fissare le idee diciamo che l'indice 1 corrisponde a $s_z = 1/2$, l'indice 2 a $s_z = -1/2$. Le due componenti χ^σ , volendo, si possono raggruppare in un vettore bidimensionale $\begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}$.

Lo spinore trasforma secondo la rappresentazione 1/2 del gruppo $SO(3)$, o meglio $SU(2)$, e, a seconda dei modi di scrivere si può rappresentare con

$$\chi' = R(\boldsymbol{\theta})\chi \quad \chi^{\mu'} = R_{\mu}^{\mu'} \chi^\mu \quad R = \exp(i\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\theta}) \quad (11.88)$$

In astratto fissati due vettori di base e_μ , uno spinore si scrive $\chi = \chi^\mu e_\mu$ con abuso di linguaggio chiamiamo spinore l'insieme delle due componenti, esattamente come nel caso di un vettore tridimensionale.

Il prodotto tensoriale fra due rappresentazioni spinoriali è lo spazio lineare generato da $e_\mu \otimes e_\nu$, quindi gli oggetti della forma

$$\chi = \chi^{\mu\nu} e_\mu \otimes e_\nu$$

con la solita convenzione chiamiamo spinore di rango 2 l'insieme delle componenti $\chi^{\mu\nu}$ e così via. Per rotazioni le leggi di trasformazione delle componenti di $\chi^{\mu\nu}$ sono quelle indotte dalla trasformazione dei vettori di base e sono la semplice generalizzazione della (11.88):

$$\chi^{\mu'_1 \mu'_2 \dots \mu'_k} = R_{\mu_1}^{\mu'_1} R_{\mu_2}^{\mu'_2} \dots R_{\mu_k}^{\mu'_k} \chi^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_k} \quad (11.89)$$

Questo è quello che si intende per prodotto di rappresentazioni. Gli spinori di rango k costituiscono perciò una rappresentazione, riducibile, del gruppo delle rotazioni. La decomposizione in rappresentazioni irriducibili corrisponde alla regola di addizione del momento angolare, come vedremo dettagliatamente studiando le rappresentazioni dei gruppi. Ad esempio

$$1/2 \otimes 1/2 = 0 \oplus 1$$

Si vede facilmente che gli spinori *simmetrici* di rango k costituiscono una rappresentazione irriducibile con spin $k/2$.

- 1) Dalla (11.89) discende che uno spinore simmetrico si trasforma in uno spinore simmetrico, quindi gli spinori simmetrici da soli formano una rappresentazione del gruppo.
- 2) Il massimo autovalore di S_z è $k/2$, corrispondente alla componente $\chi^{11\dots 1}$. Siccome lo spazio è una rappresentazione deve contenere anche tutti i vettori che si ottengono applicando l'operatore di discesa S_- , arrivando fino a $S_z = -k/2$, in totale $2 \cdot k/2 + 1 = k + 1$.
- 3) Il numero di spinori simmetrici indipendenti di rango k è $k + 1$. Infatti l'ordine in cui compaiono in χ gli indici 1,2 non importa, essendo χ simmetrico, dobbiamo quindi contare in quanti modi possa comparire l'indice 1: se compare s volte, automaticamente 2 comparirà $k - s$ volte. 1 può comparire 0 volte, 1 volta ... k volte, in tutto $k + 1$ possibilità. Quindi lo spazio ha dimensione $k + 1$ ma questa è proprio la dimensione della rappresentazione irriducibile di spin $k/2$, che abbiamo già visto essere contenuta nello spazio, quindi lo spazio coincide con la rappresentazione irriducibile.

Nel caso dei vettori tridimensionali esiste una procedura per passare da un tensore ad uno scalare, cioè ad un oggetto invariante sotto rotazioni: consiste nel considerare la traccia $\text{Tr}(T)$, che è invariante sotto rotazioni ovviamente.

Nel caso di uno spinore sappiamo, ed è facile in ogni caso verificarlo, che la combinazione *antisimmetrica* di due spin $1/2$ porta ad uno spin 0 , ad uno scalare cioè

$$\alpha^1 \beta^2 - \alpha^2 \beta^1 \quad \text{invariante per rotazioni}$$

Introduciamo il simbolo antisimmetrico $\varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = 1$. L'operazione di antisimmetrizzazione si scrive allora

$$\alpha^\mu \beta^\nu \varepsilon_{\mu\nu} \tag{11.90}$$

Si può anche interpretare $\varepsilon_{\mu\nu}$ come un tensore che permette⁸ di “abbassare gli indici”, come δ_{ij} nel caso tridimensionale, e riscrivere la (11.90) nella forma $\alpha^\mu \beta_\mu$. Il punto importante è che, analogamente a δ_{ij} nel caso tridimensionale, il tensore $\varepsilon_{\mu\nu}$ è un tensore invariante per rotazioni, cioè sotto rotazioni va in se stesso. Interpretato come matrice $\varepsilon = i\sigma_2$, sotto rotazioni

$$R^\mu_{\mu'} R^\nu_{\nu'} \varepsilon_{\mu\nu} \quad \Rightarrow \quad Ri\sigma_2 R^T$$

Si verifica subito che $\sigma_2 \sigma^T \sigma_2 = -\sigma$ quindi

$$Ri\sigma_2 R^T = iR\sigma_2 R^T \sigma_2 \sigma_2 = iRR^{-1}\sigma_2 = i\sigma_2 \tag{11.91}$$

quindi effettivamente ε è uno spinore invariante.

Questa stessa tecnica dimostra immediatamente l'affermazione sull'invarianza dell'operazione di traccia. Per chiarezza scriviamo lo spinore ruotato con $\tilde{\chi}$

$$\varepsilon_{\mu'\nu'} \tilde{\chi}^{\mu'\nu'} = \varepsilon_{\mu'\nu'} R^\mu_{\mu'} R^\nu_{\nu'} \chi^{\mu\nu} = \varepsilon_{\mu\nu} \chi^{\mu\nu}$$

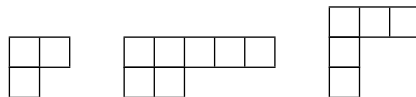
nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato la (11.91).

11.7.2 Simmetrie di spin: $\chi(\sigma)$

Torniamo allo studio delle simmetrie sotto permutazioni della funzione spinoriale. Innanzitutto la variabile spinoriale assume solo due valori, quindi qualsiasi combinazione antisimmetrica di 3 o più variabili è nulla, perchè o l'indice 1 o l'indice 2 devono comparire almeno 2 volte. Ricordiamo ora che i tableaux di Young sono *antisimmetrizzati* rispetto alle colonne quindi:

Punto 1 I tableaux di Young per la funzione spinoriale possono contenere al massimo 2 righe.

Ad esempio dei tre diagrammi seguenti i primi due sono permessi, il terzo no:



Punto 2. Un tableau di Young con k caselle spaiate rappresenta uno spin $k/2$.

Infatti come abbiamo visto il processo di antisimmetrizzazione conduce ad uno scalare, quindi tutte le variabili associate alle colonne di lunghezza 2 non cambiano sotto rotazioni. Le variabili di riga di un tableau di Young sono simmetrizzate, quindi se k caselle restano spaiate si ha uno spinore simmetrico di rango k che corrisponde appunto ad uno spin $k/2$.

⁸Questo ha un'interpretazione in termini di rappresentazioni di $SU(2)$ su cui non ci soffermiamo.

11.7.3 Simmetrie orbitali: $\varphi(\mathbf{x})$

Come abbiamo sottolineato il principio di simmetrizzazione impone la completa antisimmetria (per fermioni) per scambio contemporaneo delle variabili di spin e orbitali, questo significa che in una funzione d'onda fattorizzata del tipo

$$\chi(\sigma_1, \dots, \sigma_N) \varphi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$$

la funzione orbitale non è necessariamente antisimmetrica per permutazione delle sole variabili \mathbf{x}_i . La dualità fra diagrammi di Young di spin e orbitali indica quali simmetrie sono ammissibili per la funzione d'onda orbitale.

La prima osservazione è che contenendo i diagrammi di Young per la parte spinoriale al massimo due linee, i corrispondenti diagrammi per la parte orbitale al massimo possono contenere due colonne, cioè non possono essere simmetrizzati in più di due variabili.

Possiamo indicare gli stati attraverso il momento angolare orbitale, scrivendo perciò le funzioni d'onda in termini di tensori, in coordinate cartesiane o sferiche a seconda della convenienza. Questo è analogo alla scrittura della funzione d'onda spinoriale in termini di spinori a molte componenti. Purtroppo a differenza del caso spinoriale, il diagramma di Young non è in corrispondenza biunivoca con il momento angolare orbitale dello stato. Dal punto di vista della simmetria possiamo sempre pensare ad uno stato come prodotto di funzioni d'onda di singola particella. Concentriamoci sul caso di particelle con fisso momento angolare ℓ : lo stato si trasformerà come una rappresentazione del gruppo delle rotazioni ottenuta dal prodotto di rappresentazioni di tipo ℓ .

Esattamente come nel caso spinoriale ogni rappresentazione irriducibile del gruppo così ottenuta avrà una simmetria definita ma non sarà più vero che a un dato tipo di simmetria, cioè tableau di Young, corrisponde un'unica rappresentazione.

Rimandiamo allo studio della struttura atomica la presentazione di esempi concreti e limitiamoci qui ad alcuni casi semplici.

Consideriamo due elettroni con momento angolare 1. Le funzioni d'onda di un singolo elettrone possono essere rappresentate da un vettore ψ_i . Lo stato di due elettroni sarà un tensore del tipo $\psi_i \varphi_j$, in tutto 9 componenti. I diagrammi di Young possibili sono



Il primo corrisponde ad una combinazione antisimmetrica, il secondo ad una simmetrica.

Fare il prodotto delle rappresentazioni corrisponde a sommare due momenti angolari $\ell = 1$, si possono allora ottenere i momenti angolari $L = 0, 1, 2$, di dimensioni 1, 3, 5. In termini di funzioni d'onda questo corrisponde a

$$\Phi = \varphi \cdot \psi \quad \Phi_i = (\varphi \wedge \psi)_i \quad \Phi_{ij} = (\varphi_i \psi_j + \varphi_j \psi_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \varphi \cdot \psi)$$

cioè ad uno scalare (simmetrico), un vettore (antisimmetrico), e ad un tensore di ordine 2 a traccia nulla (simmetrico). Già in questo esempio si vede che alla combinazione simmetrica corrispondono due possibili momenti angolari: 0 e 2.

Un utile esercizio per il lettore è provare a costruire gli stati ottenuti come prodotto di 3 vettori. Fra gli altri sarebbe possibile un tensore di ordine 3 a traccia nulla, del tipo ψ_{ijk} completamente simmetrico nei tre indici. Questo corrisponde ad un tableau di Young con 3 colonne e viene eliminato dal principio di Pauli (se gli elettroni hanno gli altri numeri quantici uguali, prescindendo da spin e momento angolare).

11.8 Elementi di matrice.

Come abbiamo visto da una base per lo spazio di Hilbert di singola particella, $|s_i\rangle$ è possibile definire una base per gli stati ad N particelle, simmetrici o antisimmetrici. Un singolo

elemento di questa base, essendo scritto nella forma di somma sulle $N!$ permutazioni di N oggetti è in generale composto da $N!$ addendi, come si può immaginare è opportuno capire come si fanno a scrivere concretamente gli elementi di matrice di operatori in questa base.

Supponiamo di generare gli elementi della base a partire da vettori “semplici” $|X\rangle, |Y\rangle$ nella forma, simmetrica o antisimmetrica

$$|X\rangle_S = C_X^{(S)} \mathcal{S}|X\rangle \quad \text{oppure} \quad |X\rangle_A = C_X^{(A)} \mathcal{A}|X\rangle$$

I fattori $C_X^{(S)}, C_X^{(A)}$ sono le costanti di normalizzazione degli stati. Per semplice qui si intende che su questi vettori sappiamo scrivere facilmente gli elementi di matrice. Consideriamo un elemento di matrice di un operatore F su questa base:

$${}_S\langle X|F|Y\rangle_S \quad (11.92)$$

Questo elemento di matrice, completamente sviluppato, contiene almeno $(N!)^2$ addendi, un numero in generale proibitivamente grande, che però si riduce subito a $N!$ se teniamo conto dei seguenti fatti:

- 1) Per definizione stessa di particelle identiche, qualunque osservabile, F , è simmetrica per permutazioni, eq.(11.26), ed in particolare

$$SF = FS \quad \mathcal{A}F = F\mathcal{A} \quad (11.93)$$

- 2) Gli operatori \mathcal{S} e \mathcal{A} sono dei proiettori, e quindi

$$\mathcal{S}^\dagger = \mathcal{S} \quad \mathcal{S}^2 = \mathcal{S} \quad \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A} \quad \mathcal{A}^2 = \mathcal{A} \quad (11.94)$$

Il prodotto (11.92), usando la (11.93) e la (11.94) si semplifica notevolmente

$$\begin{aligned} {}_S\langle X|F|Y\rangle_S &= C_X^{(S)} C_Y^{(S)} \langle X|\mathcal{S}^\dagger F \mathcal{S}|Y\rangle = C_X^{(S)} C_Y^{(S)} \langle X|F \mathcal{S}^2|Y\rangle = \\ &= C_X^{(S)} C_Y^{(S)} \langle X|F \mathcal{S}|Y\rangle \equiv C_X^{(S)} \langle X|F \mathcal{S}|Y\rangle_S \end{aligned} \quad (11.95)$$

in pratica occorre simmetrizzare solo uno dei due vettori.

La (11.95) può anche essere vista come una conseguenza della decomposizione del prodotto di rappresentazioni del gruppo delle permutazioni: lo stato $F\mathcal{S}|Y\rangle$ si trasforma come il prodotto della rappresentazione simmetrica, sotto cui trasforma F , per la rappresentazione (anti)simmetrica, sotto cui si trasforma lo stato. Entrambe le rappresentazioni sono unidimensionali ed il loro prodotto è ancora la rappresentazione (anti)simmetrica dello stato di partenza. Lo stato $|X\rangle$, non simmetrizzato, è scomponibile in rappresentazioni irriducibili, nel prodotto scalare solo la rappresentazione (anti)simmetrica sopravvive.

In realtà la (11.95) può ancora essere enormemente semplificata nei casi che usualmente sono presi in considerazione. Scegliamo una base per gli stati di singola particella, $|i\rangle$. Per fissare le idee pensiamo a bosoni: una base per lo spazio a N particelle è composta, in rappresentazioni di Schrödinger, da prodotti, simmetrizzati, del tipo:

$$\psi_{i_1}(\alpha_1) \dots \psi_{i_N}(\alpha_N) \quad (11.96)$$

con la notazione che abbiamo già usato per i determinanti di Slater. L'unica cosa importante nella (11.96) è specificare quante volte compare lo stato 1, quante lo stato 2 etc., le variabili α_i non giocano alcun ruolo, in qualunque ordine sono scritte esse verranno completamente rimescolate dalle permutazioni, quindi conoscendo i “numeri di occupazione” di ogni stato di singola particella individueremo univocamente lo stato simmetrizzato. Fissiamo un ordine arbitrario, ad esempio crescente, possiamo allora scrivere lo stato (11.96) nella forma

$$|n_1, n_2 \dots\rangle_0 \quad (11.97)$$

il suffisso 0 sta ad indicare che non abbiamo ancora simmetrizzato. Lo stato indica n_1 particelle nello stato 1, n_2 particelle nello stato 2 etc. Per N particelle in totale ovviamente

$$n_1 + \dots + n_k + \dots = N \quad (11.98)$$

Una base per lo spazio di N particelle si otterrà applicando l'operazione di simmetrizzazione ai vari stati nella forma (11.97):

$$|n_1, n_2 \dots\rangle = CS |n_1, n_2 \dots\rangle_0 \quad (11.99)$$

C è una costante di normalizzazione che si può facilmente calcolare usando l'osservazione (11.95), in questo caso l'operatore F è l'identità. Scriviamo il risultato nel caso bosonico e fermionico:

$$|n_1, n_2 \dots\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}} \mathcal{S} |n_1, n_2 \dots\rangle_0 \quad (11.100a)$$

$$|i_1, \dots, i_N\rangle = \sqrt{N!} \mathcal{A} |i_1, \dots, i_N\rangle_0 = \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_P \varepsilon_P |i_1, \dots, i_N\rangle_0 \quad (11.100b)$$

Il lettore è invitato a riprodurlo, in ogni caso troverà una dimostrazione abbastanza dettagliata nell'appendice 11.B, eq.(11.162),(11.179). Per i fermioni abbiamo indicato solo *quali* stati sono occupati, il numero di occupazione non nullo può essere solo 1.

Nota. La scrittura (11.100a) può essere abbastanza ridondante nel caso di bosoni, infatti tutte le permutazioni che lasciano invariato il vettore di base $|n_1, n_2 \dots\rangle_0$ non hanno alcun effetto: queste sono le permutazioni che mescolano fra loro le variabili di ogni singolo gruppo, di n_1 o n_2 etc. particelle, e sono in numero di $n_1! n_2! \dots$. Queste permutazioni formano un sottogruppo del gruppo delle permutazioni S_N , detto gruppo di isotropia, $S_N^{(0)}$. Possiamo pensare ogni permutazione come prodotto di una permutazione che cambia le variabili inequivalenti, cioè meschia gruppi diversi, per una del gruppo di isotropia, quindi ogni permutazione "effettiva" è moltiplicata per $n_1! n_2! \dots$. Esplicitando questo fattore ed il fattore $1/N!$ che è implicito nella definizione di \mathcal{S} la (11.100a) si può riscrivere

$$|n_1, n_2 \dots\rangle = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{N!}} \sum_{P'} |n_1, n_2 \dots\rangle_0 \quad (11.101)$$

Nella (11.101) la somma è fatta **solo** sulle permutazioni che scambiano variabili fra gruppi diversi, oltre all'identità naturalmente. Una possibile sorgente di confusione è il fatto che la costante a fattore nella (11.101) è esattamente l'inversa di quella che compare nella (11.100a), il lettore faccia attenzione a quale delle due notazioni sta usando.

Facciamo qualche esempio, scrivendo esplicitamente gli stati in termini di funzioni d'onda. Chiameremo le variabili $\alpha, \beta \dots$, gli stati $1, 2, \dots$. Indichiamo anche la costante di normalizzazione definita dalle (11.100) e la notazione in termini di numero di occupazione.

2 Bosoni, in stati 1 e 2

$$|1_1, 1_2\rangle = \sqrt{2} \frac{1}{2!} \left\{ \varphi_1(\alpha) \varphi_2(\beta) + \varphi_1(\beta) \varphi_2(\alpha) \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \varphi_1(\alpha) \varphi_2(\beta) + \varphi_1(\beta) \varphi_2(\alpha) \right\} \\ C = \sqrt{2} \quad (11.102a)$$

2 Bosoni, nello stato 1

$$|2_1\rangle = \frac{1}{2!} \left\{ \varphi_1(\alpha) \varphi_1(\beta) + \varphi_1(\beta) \varphi_1(\alpha) \right\} = \varphi_1(\alpha) \varphi_1(\beta) \quad C = 1 \quad (11.102b)$$

3 Bosoni, 2 nello stato 1 ed 1 nello stato 2 Scriviamo esplicitamente il passaggio che fa passare dalla (11.100a) alla (11.101). Le sei permutazioni di S_3 sono

$$P_0, P_{\alpha\beta}, P_{\alpha\gamma}, P_{\beta\gamma}, \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ \beta & \gamma & \alpha \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ \gamma & \alpha & \beta \end{pmatrix} \quad (11.102c)$$

P_0 è l'identità, $P_{\alpha\beta}$ etc. sono gli scambi e le ultime due sono le permutazioni cicliche, indicate nella notazione abituale per le permutazioni, l'ultima ad esempio, significa

$$\alpha \rightarrow \gamma \quad \beta \rightarrow \alpha \quad \gamma \rightarrow \beta$$

Lo stato non simmetrizzato di partenza è

$$|2_1, 1_2\rangle_0 = \varphi_1(\alpha)\varphi_1(\beta)\varphi_2(\gamma)$$

Applicando l'operatore \mathcal{S} per esteso, con le permutazioni nell'ordine scritto nella (11.102c) si hanno i sei termini:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{3!} \left\{ \varphi_1(\alpha)\varphi_1(\beta)\varphi_2(\gamma) + \varphi_1(\beta)\varphi_1(\alpha)\varphi_2(\gamma) + \varphi_1(\gamma)\varphi_1(\beta)\varphi_2(\alpha) + \right. \\ & \quad \left. + \varphi_1(\alpha)\varphi_1(\gamma)\varphi_2(\beta) + \varphi_1(\beta)\varphi_1(\gamma)\varphi_2(\alpha) + \varphi_1(\gamma)\varphi_1(\alpha)\varphi_2(\beta) \right\} \\ & = \frac{1}{3} \left\{ \varphi_1(\alpha)\varphi_1(\beta)\varphi_2(\gamma) + \varphi_1(\alpha)\varphi_1(\gamma)\varphi_2(\beta) + \varphi_1(\beta)\varphi_1(\gamma)\varphi_2(\alpha) \right\} \end{aligned}$$

Dalla (11.100a), $C = \sqrt{3!/2!} = \sqrt{3}$ quindi

$$|2_1, 1_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \varphi_1(\alpha)\varphi_1(\beta)\varphi_2(\gamma) + \varphi_1(\alpha)\varphi_1(\gamma)\varphi_2(\beta) + \varphi_1(\beta)\varphi_1(\gamma)\varphi_2(\alpha) \right\} \quad (11.102d)$$

Questo è lo stesso risultato che si sarebbe ottenuto applicando direttamente la (11.101) e sommando sulle uniche due permutazioni "effettive": $P_{\alpha\gamma}, P_{\beta\gamma}$, oltre all'identità naturalmente.

2 Fermioni, stati a, b .

$$|a, b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_a(\alpha)\psi_b(\beta) - \psi_a(\beta)\psi_b(\alpha) \right\} \quad C = \sqrt{2} \quad (11.102e)$$

11.8.1 Relazione di completezza.

Nel caso di una particella, usando stati normalizzati si ha la decomposizione dell'identità

$$1 = \sum_i |i\rangle\langle i| \quad (11.103)$$

Nel caso di N particelle la base è sui vettori simmetrizzati, quindi, scrivendo le formule per il caso bosonico:

$$1 = \sum'_{n_1 \dots} |n_1 \dots\rangle\langle n_1 \dots| \quad (11.104)$$

la somma va fatta sulle configurazioni non equivalenti di numeri di occupazione. Se si somma su tutte le configurazioni ognuna è contata $N!$ volte ma la scrittura è molto più semplice:

$$1 = \frac{1}{N!} \sum_{n_1 \dots} |n_1 \dots\rangle\langle n_1 \dots| \quad (11.105)$$

Ad esempio per una ampiezza fra uno stato a due particelle iimpulto $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ e uno con impulsi $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$:

$$\langle \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 | A | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \rangle = \int_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle \frac{1}{2!} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | A | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \rangle \quad (11.106)$$

e l'integrale nella (11.106) non è vincolato. Torneremo più avanti sulla rilevanza fisica della (11.106).

Come esempio consideriamo la relazione (11.106) nel caso $A = 1$, cioè controlliamo la normalizzazione degli stati. Supporremo per semplicità che gli impulsi $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ siano diversi. Lo stato simmetrico, o antisimmetrico, è dato da

$$|\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\rangle_0 \pm |\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1\rangle_0 \right)$$

Scrivendo l'espressione analoga per lo stato con impulsi $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ si ricava

$$\langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 | \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rangle = \left(\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2} \pm \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_2} \delta_{\mathbf{p}_2, \mathbf{q}_1} \right) \quad (11.107)$$

Il fatto che compia un segno negativo nel caso fermionico non è rilevante: il segno globale delle ampiezze in cui compaiono dei fermioni è arbitrario, dipende da quale permutazione dello stato si considera, la probabilità di transizione, modulo quadro dell'ampiezza è ben definita e positiva. Usando la stessa espressione (11.107):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \rangle &= \\ &= \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left(\delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{q}_2} \pm \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_2} \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1} \right) \left(\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{k}_1} \delta_{\mathbf{p}_2, \mathbf{k}_2} \pm \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{p}_2, \mathbf{k}_1} \right) = \\ &= \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 | \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rangle \end{aligned}$$

In accordo con la completezza degli stati.

11.8.2 Operatori.

Passiamo ora alla scrittura degli elementi di matrice di operatori. Possiamo classificare gli operatori a seconda che agiscano su una particella alla volta, $F^{(1)}$ (operatori ad una particella), oppure su una coppia, $F^{(2)}$ (operatori a due particelle) etc. Normalmente questi due tipi di operatori sono sufficienti. Poichè gli operatori devono essere simmetrici, essi hanno la forma:

$$F^{(1)} = \sum_{i=1}^N f_i \quad f_i = f(\alpha_i) \quad (11.108a)$$

$$F^{(2)} = \sum_{i < j}^N f_{ij} \quad f_{ij} = f(\alpha_i, \alpha_j) \quad \text{simmetrica} \quad (11.108b)$$

Un esempio di $F^{(1)}$ è l'Hamiltoniana delle singole particelle, trascurando le interazioni reciproche:

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{x}_i) \right)$$

Un esempio di $F^{(2)}$ è l'energia di interazione elettrostatica:

$$\sum_{i < j} \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}$$

Notiamo che la somma, nella (11.108b) è fatta sulle *coppie* distinte.

È abbastanza semplice, ma un pò noioso, esprimere gli elementi di matrice di operatori di tipo $F^{(1)}$, $F^{(2)}$ in termini di elementi di matrice di *singola* particella. Consideriamo ad esempio operatori $F^{(1)}$. Ci sono due possibilità: o nessuna particella cambia stato, e allora avremo gli elementi di matrice diagonali nella base (11.100), o al massimo una particella cambia stato, perchè le funzioni (o operatori) f nella eq.(11.108a) dipendono dalle variabili di una sola particella. Per gli elementi di matrice diagonali è abbastanza ovvio che

$$\langle n_1, n_2 \dots | F^{(1)} | n_1, n_2 \dots \rangle = \sum_i n_i \langle i | f | i \rangle \quad \text{bosoni} \quad (11.109a)$$

$$\langle i_1, \dots, i_N | F^{(1)} | i_1, \dots, i_N \rangle = \sum_i \langle i | f | i \rangle \quad \text{fermioni} \quad (11.109b)$$

Negli elementi di matrici fuori diagonale, ci sarà una particella che passa dallo stato j allo stato i

$$\langle n_i, n_j - 1 | F^{(1)} | n_i - 1, n_j \rangle = \sqrt{n_i n_j} f_{ij} \quad \text{bosoni} \quad (11.110a)$$

$$\langle i | F^{(1)} | j \rangle = f_{ij} \quad \text{fermioni} \quad (11.110b)$$

Nel caso fermionico abbiamo indicato per brevità solo lo stato delle particelle che cambiano, nel caso bosonico, per lo stesso motivo, solo i numeri di occupazione che cambiano. Gli elementi di matrice f_{ij} sono quelli di singola particella

$$f_{ij} = \int_{\alpha, \beta} \psi_i^*(\alpha) f(\alpha, \beta) \psi_j(\beta) \quad (11.111)$$

La dimostrazione di queste, e delle formule seguenti, si trova in appendice, vediamo però alcuni esempi semplici.

2 bosoni. Si scrive immediatamente, per il termine diagonale

$$\begin{aligned} \langle 1_1, 1_2 | F^{(2)} | 1_1, 1_2 \rangle &= \sqrt{2} \int \varphi_1^*(\alpha) \varphi_2^*(\beta) (f(\alpha) + f(\beta)) \quad (11.112a) \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \varphi_1(\alpha) \varphi_2(\beta) + \varphi_1(\beta) \varphi_2(\alpha) \right\} \end{aligned}$$

Il fattore $\sqrt{2}$ può essere considerato o un caso particolare della (11.95), qui $C = \sqrt{2}$, vedi eq.(11.102a), o dovuto al fatto che i due termini nella (11.102a) danno lo stesso contributo e semplificano il fattore $1/\sqrt{2}$. Nel calcolare la (11.112a) teniamo ora conto dell'ortogonalità degli stati, per cui, ad esempio:

$$\int \varphi_1^*(\alpha) \varphi_2^*(\beta) f(\alpha) \varphi_1(\beta) \varphi_2(\alpha) = \int_{\alpha} \varphi_1^*(\alpha) f(\alpha) \varphi_2(\alpha) \int_{\beta} \varphi_2^*(\beta) \varphi_1(\beta) = 0$$

e quindi la (11.112a) risulta

$$f_{11} + f_{22}$$

in accordo con la (11.110). Ormai dovrebbe essere chiaro il metodo di calcolo, lasciamo al lettore la verifica delle altre formule in qualche caso particolare.

Per operatori a due particelle al massimo si hanno due cambiamenti di stato. Riportiamo

gli elementi di matrice più importanti, per i bosoni:

$$\begin{aligned} \langle n_1, \dots | F^{(2)} | n_1, \dots \rangle &= \sum_i \frac{n_i(n_i - 1)}{2} \langle i, i | f | i, i \rangle + \sum_{i < j} (\langle ij | f | ij \rangle + \langle ij | f | ji \rangle) \quad (\text{diag.}) \\ \langle n_i, n_j - 1 | F^{(2)} | n_i - 1, n_j \rangle &= \sqrt{n_i n_j} \sum_{k \neq i, j} n_k \left(\langle i, k | f | j, k \rangle + \langle i, k | f | k, j \rangle \right) \quad (11.113) \\ &+ \sqrt{n_i n_j} (n_j - 1) \langle i, j | f | j, j \rangle + \sqrt{n_i n_j} (n_i - 1) \langle i, i | f | j, i \rangle \quad (\text{cambia 1 stato}) \\ \langle n_i, n_j, n_k - 1, n_l - 1 | F | n_i - 1, n_j - 1, n_k, n_l \rangle &= \\ &= \sqrt{n_i n_j n_k n_l} (\langle i, j | f | k, l \rangle + \langle i, j | f | l, k \rangle) \quad (\text{cambiano 2 stati}) \end{aligned}$$

e per i fermioni

$$\langle i_1 \dots | F^{(2)} | i_1 \dots \rangle = \sum_{i < j} (\langle ij | f | ij \rangle - \langle ij | f | ji \rangle) \quad \text{elementi diagonali} \quad (11.114a)$$

$$\langle i | F^{(2)} | j \rangle = \sum_{k \neq i, j} (\langle ik | f | jk \rangle - \langle ik | f | kj \rangle) \quad \text{cambio di 1 stato} \quad (11.114b)$$

$$\langle ij | F^{(2)} | kl \rangle = (\langle ij | f | kl \rangle - \langle ij | f | lk \rangle) \quad \text{cambio di 2 stati} \quad (11.114c)$$

11.9 Rappresentazione di Fock.

Nel paragrafo 11.8 abbiamo fatto vedere che la base di stati definita tramite i numeri di occupazione è particolarmente comoda ed intuitiva per descrivere lo stato di N particelle ed abbiamo accennato al calcolo degli elementi di matrice di vari operatori in questa base. Dal punto di vista astratto abbiamo usato i numeri di occupazione come le variabili dinamiche del nostro sistema, nel senso che lo stato era determinato dall'assegnazione di questi numeri, che costituivano perciò un insieme massimale di osservabili compatibili. Una rappresentazione di questo tipo si chiama **rappresentazione di Fock**, ed è ciò che studieremo più in dettaglio in questo paragrafo.

11.9.1 Bosoni.

Cominciamo da una semplice osservazione. L'Hamiltoniana di un sistema di N particelle in generale è scrivibile come la somma di un termine relativo alle singole particelle, H_0 , ed uno dovuto all'interazione reciproca, nel linguaggio del paragrafo precedente un operatore di tipo $F^{(1)}$ ed uno di tipo $F^{(2)}$. Se non consideriamo l'interazione il sistema è fatto da N "copie" identiche della Hamiltoniana di singola particella:

$$H_0 = \sum_{a=1}^N h_0(a) \quad (11.115)$$

L'Hamiltoniana h_0 ha un certo spettro con autovalori ε_i , eventualmente degeneri. Un autostato sarà della forma $|i, \sigma\rangle$, dove σ sta ad indicare i numeri quantici aggiuntivi da specificare, ad esempio la proiezione dello spin sull'asse z o altro, collettivamente scriveremo $|\alpha\rangle$. Per brevità chiameremo **modo** la specifica di un certo tipo di stato, la nomenclatura riflette, volutamente, quanto si fa per la radiazione elettromagnetica in una cavità.

Consideriamo ora un *singolo modo*. In questo modo possono essere presenti 0 particelle, 1 particella, 2 particelle etc. e questo modo darà all'energia totale del sistema un contributo

$$0 \cdot \varepsilon_\alpha, \quad 1 \cdot \varepsilon_\alpha, \quad 2 \cdot \varepsilon_\alpha, \dots, \quad n \cdot \varepsilon_\alpha \dots \quad (11.116)$$

cioè un multiplo *intero* dell'autovalore dell'energia associato a quel modo: si ha cioè **lo spettro di un oscillatore armonico** per ogni modo, eccettuata l'energia di punto 0. È allora

abbastanza ovvio pensare al singolo modo come un oscillatore e interpretare la presenza di particelle come stati eccitati di quel singolo modo. Su un singolo oscillatore possiamo definire gli operatori di creazione ed annichilazione a_α^* , a_α che fanno aumentare o diminuire di 1 il numero di occupazione e quindi, letteralmente, creano o distruggono una particella in quel dato modo. Per questi operatori vale la **relazione di commutazione**

$$[a_\alpha, a_\alpha^*] = 1 \quad (11.117)$$

Definito lo stato di vuoto, $|0\rangle$, che denota l'assenza di particelle, possiamo, per ogni modo, costruire uno spazio di Hilbert a partire dagli operatori a, a^* . Come visto nello studio dell'oscillatore armonico lo stato n -esimo, normalizzato, è dato da

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{*n} |0\rangle \quad (11.118)$$

È ovvio che l'Hamiltoniana per questo modo sarà scritta

$$h_\alpha = \varepsilon_\alpha a_\alpha^* a_\alpha \quad (11.119)$$

e questa, sugli stati (11.118) ha proprio autovalori $n\varepsilon_\alpha$.

Il punto importante è però un altro: lo stato a n particelle è identificato dalla (11.118): ma questa espressione è **automaticamente simmetrica** cioè abbiamo implementato in modo puramente algebrico la simmetria bosonica degli stati, non abbiamo più bisogno di scrivere una esplicita somma sulle permutazioni, come fatto in rappresentazione di Schrödinger.

Cosa succede quando consideriamo più di un modo? Dal punto di vista dei singoli modi le variabili e gli operatori riferentesi a modi diversi non sembrano avere niente a che fare l'uno con l'altro, quindi è naturale imporre

$$[a_\alpha, a_\beta^*] = [a_\alpha, a_\beta] = 0 \quad \alpha \neq \beta \quad (11.120)$$

Anche questo è in perfetto accordo con l'interpretazione in termini di particelle *bosoniche*. Consideriamo infatti uno stato $|n_\alpha, n_\beta\rangle$. Se le particelle sono bosoni lo stato deve essere simmetrico:

$$|n_\alpha, n_\beta\rangle = |n_\beta, n_\alpha\rangle$$

Se decidiamo un qualsiasi ordine di scrittura per gli operatori di creazione, i due stati sono rappresentati da

$$\frac{1}{\sqrt{n_\alpha!}} a_\alpha^{*n_\alpha} \frac{1}{\sqrt{n_\beta!}} a_\beta^{*n_\beta} |0\rangle \quad \frac{1}{\sqrt{n_\beta!}} a_\beta^{*n_\beta} \frac{1}{\sqrt{n_\alpha!}} a_\alpha^{*n_\alpha} |0\rangle \quad (11.121)$$

e questi due stati sono *identici* in virtù delle (11.120). Nella (11.121) abbiamo fatto un piccolo abuso di notazione: in realtà ogni modo ha il suo "vuoto", abbiamo indicato con lo stesso simbolo $|0\rangle$ la quantità

$$|0\rangle_\alpha |0\rangle_\beta$$

Più ancora: se non sono presenti altre particelle, significa che *tutti* gli altri modi sono nello stato fondamentale, quindi in realtà bisognerebbe scrivere, osservando che lo spazio di Hilbert di tutti i modi è il prodotto tensoriale degli spazi dei singoli modi:

$$|0\rangle = \bigotimes_\alpha |0\rangle_\alpha \quad (11.122)$$

Riassumendo: l'Hamiltoniana per un sistema di particelle bosoniche non interagenti è scrivibile nella forma

$$H_0 = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a_\alpha^* a_\alpha \quad (11.123)$$

con operatori di creazione e distruzione che soddisfano l'algebra:

$$[a_\alpha, a_\beta^*] = \delta_{\alpha\beta} \quad [a_\alpha, a_\beta] = [a_\alpha^*, a_\beta^*] = 0 \quad (11.124)$$

Possiamo definire un operatore *numero* per ogni modo,

$$n_\alpha = a_\alpha^* a_\alpha \quad (11.125)$$

e si verifica subito che tutti questi operatori *commutano* con H_0 , il che significa semplicemente che in assenza di interazione ogni modo evolve indipendentemente. Il numero *totale* di particelle è dato dall'autovalore di

$$N = \sum_\alpha n_\alpha \quad (11.126)$$

A priori non c'è nessuna necessità che N sia finito e che sia conservato nel interagente, dipende appunto da come è fatta l'interazione.

Come esempio possiamo considerare un insieme di particelle libere di massa m e spin 0. L'impulso di una particella determina il suo stato e quindi l'Hamiltoniana del sistema sarà

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a^*(\mathbf{p})a(\mathbf{p}) \equiv \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a_{\mathbf{p}}^* a_{\mathbf{p}} \quad (11.127)$$

Nella (11.127) compare una somma su autovalori continui, cioè un integrale, chiariamo cosa significa e come sono definite le relazioni di commutazione in questo caso. Ci sono due modi equivalenti di procedere.

Modi continui.

La forma concreta in cui è scritta la somma sugli stati dipende dalla normalizzazione della funzione d'onda. Scriviamo la cosa in generale, dato un prodotto scalare

$$\langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_1 \rangle = C \delta^3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \quad (11.128)$$

la somma sugli stati è fatta in modo da preservare la relazione di unitarietà:

$$\sum_{\mathbf{p}} \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}_1 \rangle = \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_1 \rangle$$

Verifichiamo che in questo caso:

$$\sum_{\mathbf{p}} \equiv \frac{1}{C} d^3 \mathbf{p} \quad (11.129)$$

Infatti:

$$\sum_{\mathbf{p}} \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}_1 \rangle = \frac{1}{C} \int d^3 \mathbf{p} C \delta^3(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}) C \delta^3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) = C \delta^3(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1) = \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_1 \rangle$$

Usualmente si considera come base per le onde piane l'insieme delle funzioni del tipo

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \exp(i \frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{x}) \quad (11.130)$$

e per queste funzioni:

$$\langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{p}_1 \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1) \quad (11.131)$$

Quindi

$$\sum_{\mathbf{p}} \equiv \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (11.132)$$

Nell'ultima notazione si è usato il "numero d'onda" $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. La normalizzazione delle regole di commutazione di a, a^* segue dalla (11.131). lo stato di vuoto è sempre normalizzato:

$$\langle 0|0\rangle = 1 \quad (11.133)$$

Usando $a_{\mathbf{p}}|0\rangle = 0$ si ha

$$\langle \mathbf{p}_2|\mathbf{p}_1\rangle = \langle 0|a(\mathbf{p}_2)a^*(\mathbf{p}_1)|0\rangle = \langle 0|[a(\mathbf{p}_2)a^*(\mathbf{p}_1)]|0\rangle$$

quindi

$$\boxed{[a(\mathbf{p}_2)a^*(\mathbf{p}_1)] = (2\pi\hbar)^3\delta^3(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)} \quad (11.134)$$

Modi discreti.

Supponiamo che le particelle siano immerse in una scatola di lato L , centrata nell'origine delle coordinate. Per semplicità supponiamo che siano fissate delle condizioni al contorno *periodiche*, invece di annullare la funzione al bordo della scatola. Questo rende più semplici i passaggi algebrici successivi e non ha alcuna influenza visto che alla fine si considererà il limite $L \rightarrow \infty$. Le onde piane, soluzione dell'equazione di Schrödinger per particella libera, devono soddisfare a questa condizione di periodicità, quindi ad esempio:

$$\psi(x = \frac{L}{2}, y, z) = \psi(x = -\frac{L}{2}, y, z)$$

cioè

$$e^{ip_x L/2\hbar} = e^{-ip_x L/2\hbar} \Rightarrow \frac{p_x L}{\hbar} = 2\pi n_x$$

con n_x intero, positivo o negativo. Questo per ogni direzione. Gli impulsi sono perciò discretizzati e valgono

$$\mathbf{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}(n_x, n_y, n_z) \quad (11.135)$$

I numeri quantici sono discreti, quindi non ci sono problemi a interpretare

$$[a(\mathbf{n}), a^*(\mathbf{m})] = \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} \delta_{n_z m_z} \quad (11.136)$$

Per $L \rightarrow \infty$ possiamo approssimare la somma sugli indici discreti in termini di integrale:

$$\sum_n \rightarrow \int dn$$

Dalla (11.135) segue

$$dn = L^3 \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \Rightarrow \delta^3(\mathbf{n}) \rightarrow \frac{1}{L^3} (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p}) \quad (11.137)$$

Con questa scelta compare un fattore L^3 nella somma degli stati, che si cancella negli elementi di matrice con i fattori $L^{-3/2}$ che compaiono nelle normalizzazioni.

La cosa importante, ben nota, è che la densità del numero di modi nella cavità è

$$\boxed{dn = L^3 \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \equiv L^3 \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}} \quad (11.138)$$

Una normalizzazione spesso usata è

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}{\hbar}} \quad \int d^3\mathbf{x} \psi_{\mathbf{n}_1}^* \psi_{\mathbf{n}_2} = \delta_{\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2} \rightarrow \frac{1}{L^3} (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p}) \quad (11.139)$$

11.9.2 Fermioni.

Anche nel caso fermionico l'energia nei singoli modi è semplice:

$$0 \quad 1 \cdot \varepsilon_\alpha \quad (11.140)$$

perchè il principio di Pauli impedisce di avere più di un fermione per stato. Possiamo inventare un meccanismo con operatori di salita e discesa, ma dovremo preservare l'antisimmetria degli stati. La soluzione è di sostituire al posto dei commutatori nella (11.117) degli **anticommutatori**:

$$\boxed{\{a_\alpha, a_\alpha^*\} = 1 \quad \{a_\alpha, a_\beta\} = \{a_\alpha^*, a_\beta^*\} = 0} \quad (11.141)$$

dove

$$\{A, B\} \equiv AB + BA$$

Per ogni modo lo spazio di Hilbert è bidimensionale: è costituito dal vuoto e dal primo stato eccitato, infatti l'ultima delle equazioni (11.141) implica

$$a_\alpha^* a_\alpha^* |0\rangle = 0$$

Abbiamo assunto che operatori in modi diversi **anticommutino** fra loro.

L'Hamiltoniana al solito si scrive

$$H_0 = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a_\alpha^* a_\alpha \quad (11.142)$$

11.9.3 Operatori in rappresentazione di Fock.

La rappresentazione di Fock è particolarmente utile ed intuitiva nella scrittura degli operatori. Riconsideriamo gli operatori ad una particella. Come abbiamo detto nel paragrafo 11.8 questi possono produrre al massimo il cambio di stato di una particella, quindi in termini di operatori di creazione e distruzione devono avere la forma

$$\sum_{\alpha\beta} \Lambda_{\alpha\beta} a_\alpha^* a_\beta$$

Ci si convince subito che

$$F^{(1)} = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} a_\alpha^* a_\beta \quad (11.143)$$

La procedura di calcolo consiste nello spostare verso destra gli operatori di distruzione a , fino a che, agendo sullo stato di vuoto, danno zero. Allo stesso tempo occorre spostare a_α^* verso sinistra. Nello spostamento si hanno dei commutatori, che andranno a costruire l'elemento di matrice. Consideriamo ad esempio lo stato di una particella e calcoliamo $\langle i | F^{(1)} | j \rangle$ sostituendo l'espressione (11.143)

$$\begin{aligned} \langle i | F^{(1)} | j \rangle &= \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} \langle 0 | a_i a_\alpha^* a_\beta a_j^* | 0 \rangle = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} \langle 0 | [a_i, a_\alpha^*] [a_\beta, a_j^*] | 0 \rangle = \\ &= \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} \delta_{i\alpha} \delta_{j\beta} = f_{ij} \end{aligned} \quad (11.144)$$

Nel caso fermionico il calcolo è identico. Il risultato (11.144) è proprio quello ottenuto nel paragrafo 11.8.

Per gli operatori a due particelle

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta, \gamma\delta} \langle \alpha\beta | f | \gamma\delta \rangle a_\alpha^* a_\beta^* a_\gamma a_\delta \quad (11.145)$$

Lasciamo al lettore verificare che con (11.145) si riottengono i risultati già visti.

11.10 Una discussione sul significato fisico.

In questo paragrafo vogliamo discutere brevemente alcuni punti della procedura di (anti)simmetrizzazione per illustrare dove entrano le ipotesi fisiche e dove invece è puramente questione di matematica.

Il problema principale è il seguente. Supponiamo di avere uno spazio di Hilbert della forma (??)

$$\mathcal{H}^{(N)} = \bigotimes_1^N \mathcal{H} \quad (11.146)$$

Applicare il principio di simmetrizzazione equivale a dire che una base per gli stati fisici è data da

$$\mathcal{S}|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \quad \text{oppure} \quad \mathcal{A}|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle$$

dove $|\lambda_i\rangle$ è un vettore di base di \mathcal{H} , \mathcal{S} e \mathcal{A} rispettivamente gli operatori di simmetrizzazione ed antisimmetrizzazione. Questa è una definizione matematica, per l'esattezza una proiezione di $\mathcal{H}^{(N)}$ su un suo sottospazio, nei due casi lo spazio degli stati fisici è

$$\mathcal{F} = \mathcal{S} \left[\mathcal{H}^{(N)} \right] \quad \mathcal{F} = \mathcal{A} \left[\mathcal{H}^{(N)} \right] \quad (11.147)$$

In fisica la questione è un pò più complessa, la decomposizione si riferisce ad un sistema di particelle identiche, quindi in primo luogo bisogna definire cosa si intende per particelle identiche. La cosa naturale è dire che le particelle identiche sono quelle descritte dai vettori di base del singolo spazio \mathcal{H} . Ma la cosa non è molto soddisfacente nè dal punto di vista fisico, come vedremo, nè da quello matematico. Ad esempio si potrebbe pensare di accoppiare a due a due gli spazi \mathcal{H} , $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ e usare i vettori di base di $\tilde{\mathcal{H}}$ per fare la simmetrizzazione, definire ad esempio

$$\mathcal{F} = \mathcal{S} \left[\bigotimes_1^{N/2} \tilde{\mathcal{H}} \right]$$

come vedremo questa definizione porterebbe a risultati completamente diversi, quale delle due è giusta? In altri termini perchè le "particelle" definite da \mathcal{H} sono migliori di quelle definite da $\tilde{\mathcal{H}}$?

11.10.1 Esempio.

Consideriamo un esempio molto semplice: due fermioni, diciamo il protone ed il neutrone per concretezza, in onda S , cioè in uno stato simmetrico dal punto di vista orbitale. Gli unici gradi di libertà rimasti sono quelli di spin, ed il principio di Pauli opera la seguente selezione degli stati:

- pp : singoletto di spin, antisimmetrico
- pn : le particelle sono diverse $S = 0, 1$ entrambi permessi
- nn : singoletto di spin, antisimmetrico

per un totale di sei stati. Indicando con $\Pi_0^{(S)}$ e $\Pi_1^{(S)}$ i proiettori sugli stati di spin 0 e 1 possiamo anche scrivere le tre Hamiltoniane relative ai tre sistemi:

$$pp : A_{pp} \Pi_0^{(S)} \quad (11.148a)$$

$$pn : A_{pn} \Pi_0^{(S)} + B_{pn} \Pi_1^{(S)} \quad (11.148b)$$

$$nn : A_{nn} \Pi_0^{(S)} \quad (11.148c)$$

Stiamo supponendo che lo spin totale sia un buon numero quantico, quindi il sistema pn ha uno stato non degenero, il singoletto, ed uno stato con degenerazione tre, il tripletto. Stiamo anche assumendo che p, n siano delle particelle “elementari” a cui si applica il principio di Pauli e che siano particelle diverse.

Ricordiamo che il proiettore sul tripletto di spin è un proiettore su uno spazio tridimensionale, esplicitamente, indicando gli stati con $|S.S_z\rangle$:

$$\Pi_1^{(S)} = |1, 1\rangle\langle 1, 1| + |1, 0\rangle\langle 1, 0| + |1, -1\rangle\langle 1, -1| \equiv \Pi_{1,1}^{(S)} + \Pi_{1,0}^{(S)} + \Pi_{1,-1}^{(S)} \quad (11.149)$$

Notiamo che, come al solito, stiamo considerando gli stati di spin $|+\rangle$ e $|-\rangle$ come due stati diversi della *stessa* particella. Sorge abbastanza spontaneo il dubbio: perchè non considerare anche la “specie” del fermione, cioè p, n come “stati” diversi di un fermione? È compatibile questa interpretazione col principio di Pauli? La risposta è *si*. Chiamiamo nucleone, N , questo fermione “ipotetico”. Indicando con $+, -$ le due specie poniamo $|p\rangle = |N, +\rangle, |n\rangle = |N, -\rangle$. Possiamo sempre considerare dei proiettori, unidimensionali, sulle combinazioni simmetriche e antisimmetriche

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|N+\rangle|N-\rangle + |N-\rangle|N+\rangle) \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|N+\rangle|N-\rangle - |N-\rangle|N+\rangle)$$

Chiamiamo questi proiettori $\Pi_{1,0}^{(T)}$ e $\Pi_0^{(T)}$ in analogia con i proiettori di spin. Inserendo questi proiettori, e gli analoghi per gli altri sistemi, otteniamo per le Hamiltoniane:

$$pp : \quad A_{pp} \Pi_0^{(S)} \Pi_{1,1}^{(T)} \quad (11.150a)$$

$$pn : \quad A_{pn} \Pi_0^{(S)} \Pi_{1,0}^{(T)} + B_{pn} \Pi_1^{(S)} \Pi_0^{(S)} \quad (11.150b)$$

$$nn : \quad A_{nn} \Pi_0^{(S)} \Pi_{1,-1}^{(T)} \quad (11.150c)$$

Le (11.150) sono assolutamente identiche alle Hamiltoniane (11.148) abbiamo solo antisimmetrizzato o simmetrizzato su una fittizia variabile “muta”. In termini un pò più formali: abbiamo allargato lo spazio di singola particella a due dimensioni (oltre allo spin), con i vettori $|N\pm\rangle$. Lo spazio corrispondente di due particelle avrebbe dimensione 4, essendo ottenuto dalle 4 combinazioni $|N\pm\rangle \otimes |N\pm\rangle$. Le singole Hamiltoniane sono ottenute troncando questo spazio 4 dimensionale in 3 modi diversi: nel primo caso abbiamo preso come stati fisici solo gli stati pp , nel secondo solo gli stati pn , nel terzo solo gli stati nn . Possiamo pensare di associare una “carica” ± 1 alle due specie. Il sottospazio pn a cui siamo interessati corrisponde a prendere solo gli stati a “carica” 0. Questa precisazione tecnica è importante perchè oltre a scrivere l’Hamiltoniana dobbiamo dire su che spazio agisce.

La (11.150b) dice che possiamo sempre considerare due particelle diverse (fermioniche o bosoniche entrambi) come stati di una stessa particella: basta allargare lo spazio di Hilbert aggiungendo un “numero quantico” per le specie, antisimmetrizzare o simmetrizzare opportunamente e imporre dei vincoli allo spazio fisico. Ci sono due casi possibili

- a) La costruzione (11.150) è puramente formale e serve solo a complicare la descrizione.
- b) La costruzione indica una qualche parentela fra le specie. In altre parole effettivamente le due specie p, n sono stati della stessa particella o almeno lo sono in qualche approssimazione.

Chiaramente il caso interessante è il secondo. Rimanendo al caso di due sole specie la connessione fra specie $+$ e specie $-$ potrebbe essere di due tipi:

- i) Uno scambio fra le specie, cioè un gruppo tipo \mathbb{Z}_2 che agisce con $p \leftrightarrow n$.
- ii) Gli stati $+$ e $-$ sono connessi da un qualche gruppo di simmetria interno, analogo al gruppo delle rotazioni che connette gli stati di spin $|+\rangle, |-\rangle$, cioè un gruppo tipo $SU(2)$.

Analizziamo i due casi separatamente per capire le possibili implicazioni.

11.10.2 Gruppo $SU(2)$.

Anticipiamo che questo è effettivamente quanto si presenta in natura per la coppia protone neutrone. Supponiamo che effettivamente p, n siano stati diversi della stessa particella e che esista un gruppo $SU(2)$ interno, chiamiamo *gruppo di isospin* questo gruppo e T i corrispondenti generatori. Siccome esistono solo due stati la rappresentazione è quella di isospin $1/2$ e gli stati $+, -$ possono essere identificati con gli autostati di T_z .

La particella N ha quindi isospin $1/2$. Uno stato di due particelle N può perciò avere isospin 0 o 1 .

Uno stato di due N dovrà essere antisimmetrico per scambio contemporaneo di spin e isospin (ripetiamo: siamo in onda S , quindi lo stato è simmetrico dal punto di vista orbitale), cioè lo stato deve essere della forma

$$|S = 1\rangle|T = 0\rangle \quad \text{oppure} \quad |S = 0\rangle|T = 1\rangle$$

La forma generale dell'Hamiltoniana è perciò

$$H_s = A\Pi_0^{(S)}\Pi_1^{(T)} + B\Pi_1^{(S)}\Pi_0^{(T)} \quad (11.151)$$

Notiamo per completezza che i proiettori sono operatori simmetrici nello scambio delle due particelle quindi l'Hamiltoniana è simmetrica per scambio, come deve essere un operatore fra particelle identiche. La (11.151) contiene molte più informazioni delle (11.150), dipende infatti solo da due parametri. In particolare;

- L'interazione pp e l'interazione nn sono uguali.
- L'interazione pn nello stato di singoletto di spin è uguale a quella pp .

Supponiamo ora, di descrivere il reale sistema protone neutrone. Ovviamente l'interazione elettromagnetica è diversa per la coppia carica pp e la coppia neutra nn , quindi al massimo possiamo considerare questa descrizione nel solo ambito delle interazioni forti, trascurando cioè l'interazione elettromagnetica.

Se per le interazioni forti le proprietà a),b) valgono o meno è una questione sperimentale che non dipende certo dal formalismo adottato: *questa proprietà è sperimentalmente verificata*. Quindi in quest'ambito abbiamo un nucleone, i suoi stati soddisfano alla simmetria di Fermi e p, n sono stati diversi della stessa particella. Come si vede da questo esempio quello che definiamo particella dipende in qualche misura dalle interazioni.

Per l'Hamiltoniana H_s i sei stati si ripartiscono fra due livelli 3 volte degeneri:

$$T = 1 : E = A \text{ stati: } (pp, nn, (pn)_{S=0}) \quad T = 0 : E = B \text{ stati: } (pn)_{S=1} \quad (11.152)$$

Questo concetto continua ad essere utile anche se teniamo conto dell'interazione elettromagnetica. Su questi stati l'interazione distingue p da n e su questo sottospazio possiamo schematizzarla come αT_z :

$$H = H_s + \alpha T_z$$

questa interazione commuta con T_z ma non commuta con gli altri generatori di isospin e risolve parzialmente la degenerazione (11.152)

$$E_{pp} = A + \alpha \quad E_{nn} = A - \alpha \quad E_{pn, S=0} = A \quad E_{pn, S=1} = B$$

si ha cioè la stessa struttura delle (11.150).

Riassumendo: per le sole interazioni forti protone - neutrone si possono essere considerati come gli stati di una singola particella. Se l'interazione elettromagnetica è piccola questa classificazione è solo approssimata. Chiaramente se le due interazioni fossero dello stesso ordine non avrebbe senso l'approssimazione e si ricadrebbe nel caso generico delle (11.150).

11.10.3 Simmetria discreta.

Un esempio in cui ha interesse considerare le due particelle p, n come ottenute l'una dall'altra attraverso una trasformazione discreta è quello del positronio. In natura esiste una particella identica all'elettrone ma di carica opposta, il positrone. In questo contesto la coppia p, n rappresenta una coppia e^+, e^- . Queste particelle possono formare uno stato legato idrogenoide, detto positronio, e l'elenco (11.150) comprende l'elenco degli stati possibili in onda S per questo sistema, nel caso e^+e^- , mentre descrive stati non legati per (e^+e^+) e (e^-e^-) .

Immaginiamo ora che esista un operatore C che faccia passare da una particella all'altra. Siccome $C^2 = 1$, se si scambia il ruolo due volte si ritorna alla stessa particella, gli autovalori di C sono ± 1 . Gli stati simmetrici o antisimmetrici nella coppia corrispondono rispettivamente ad autovalore $+1$ e -1 .

Cosa ci si guadagna ad introdurre questa operazione? Consideriamo qui solo interazioni di tipo elettromagnetico. Se questa operazione è una simmetria deve essere, nella notazione (??) $A_{pp} = A_{nn}$. Questo è effettivamente vero nel caso in esame perchè l'interazione elettromagnetica elettrone-elettrone è uguale a quella positrone-positrone, in entrambi i casi una forza Coulombiana repulsiva.

A differenza del caso precedente questa trasformazione non lega il settore pn con gli altri due, ed anche questo è corretto: l'interazione (e^+e^-) è attrattiva.

L'influenza di questo numero quantico aggiuntivo sul settore (e^+e^-) , neutro, è più sottile. Abbiamo notato che la decomposizione in stati simmetrici e antisimmetrici corrisponde alla decomposizione in autostati di C , diciamo stati pari e dispari sotto C . Se questo numero quantico è reale deve corrispondere a regole di selezione ed in effetti è proprio così. Come il lettore scoprirà dallo studio dell'elettrodinamica quantistica il positronio può decadere in fotoni, ai fotoni è possibile associare una C -parità, -1 per l'esattezza. Quindi lo stato con $C = 1$ può decadere solo in un numero pari di fotoni, quello con $C = -1$ in un numero dispari: è quello che si verifica sperimentalmente.

Questo esempio pone in luce un altro problema interessante. Supponendo che C sia un buon numero quantico, perchè non si considerano autostati di C negli altri settori? In questo problema ci sono 2 quantità conservate: la carica elettrica Q e la quantità C , detta coniugazione di carica. Queste due quantità evidentemente non commutano, ma anticommutano, cioè C manda stati a carica q in stati con carica $-q$. La scelta degli stati (??) corrisponde agli autostati di Q . Autostati di C sono però definibili nel sottospazio con $q = 0$ e questi corrispondono appunto agli stati di tipo $|p, n\rangle$.

Se volessimo diagonalizzare C al posto di Q dovremmo considerare una sovrapposizione di stati con cariche diverse, ma, come accennato precedentemente la carica elettrica è assolutamente conservata e non esistono transizioni fra stati a carica elettrica diversa, in altre parole Q è un operatore superselettivo: queste sovrapposizioni non sono quindi ammissibili.

11.10.4 Rappresentazione di Fock.

Quanto visto nel paragrafo precedente diventa abbastanza ovvio usando la rappresentazione di Fock. Innanzitutto consideriamo due specie fermioniche diverse. Gli stati di singola particella relativi alle due specie siano descritti da operatori a_i, b_i rispettivamente:

$$a_i^\dagger|0\rangle \quad b_j^\dagger|0\rangle$$

gli stati di tipo a, b hanno come base $a_i^\dagger b_j^\dagger|0\rangle$. Dire che a, b possono essere considerati come stati diversi dello stesso oggetto significa semplicemente definire A_α dove α indica una coppia di indici: (i, \pm) . Le regole di anticommutazione (per fermioni)

$$\{A_\alpha, A_\beta\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (11.153)$$

equivalgono alle regole di anticommutazione per a, b separatamente. Il procedimento di proiezione è necessario perchè lo spazio di Hilbert in rappresentazione di Fock è generato

dai monomi in A^\dagger applicati allo stato $|0\rangle$. Nel caso di due particelle ci sono tre settori possibili, in termini di A :

$$A_{i+}^\dagger A_{j+}^\dagger \quad A_{i+}^\dagger A_{j-}^\dagger \quad A_{i-}^\dagger A_{j-}^\dagger$$

se si vuole ottenere un dato settore occorre proiettare sul sottospazio desiderato. Ad esempio il settore p, n è definito da $N_a = 1, N_b = 1$, cioè una particella di tipo a ed una particella di tipo b .

Dal punto di vista della Hamiltoniana se partiamo, ad esempio, da (si sottintende la somma sugli indici):

$$H = h_i^a a_i^\dagger a_i + h_I^b b_I^\dagger b_I + a_i^\dagger b_I^\dagger V_{iI,jJ} a_j b_J$$

è facile costruire una Hamiltoniana equivalente in termini di A_α

$$\tilde{H} = \tilde{h}_\alpha A_\alpha^\dagger A_\alpha + A_\alpha^\dagger A_\beta^\dagger \tilde{V}_{\alpha\beta,\mu\nu} A_\mu A_\nu$$

lasciamo questo esercizio al lettore, che avrà cura di verificare che il vincolo sugli stati, ad esempio per il sistema a 2 particelle, commuta con \tilde{H} .

11.10.5 Lo spin.

Un caso particolarmente interessante della costruzione fin qui vista è dato dalle variabili di spin. consideriamo sempre delle particelle fermioniche, nel senso che obbediscono al principio di Pauli. Indicando con $|e_i\rangle$ i ket relativi alla parte orbitale e con $|\pm\rangle$ quelli relativi alla parte di spin (spin 1/2 per semplicità), un insieme completo di ket è dato da $|e_i\rangle|\pm\rangle$. Usando le combinazioni simmetriche ed antisimmetriche

$$S_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_i\rangle|e_j\rangle + |e_j\rangle|e_i\rangle) \quad A_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_i\rangle|e_j\rangle - |e_j\rangle|e_i\rangle)$$

gli stati selezionati da principio di Pauli sono

$$|+\rangle|+\rangle A_{ij} \tag{11.154a}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle) A_{ij} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle) S_{ij} \tag{11.154b}$$

$$|-\rangle|-\rangle A_{ij} \tag{11.154c}$$

Confrontando questo elenco con quanto detto nel paragrafo precedente vediamo che questi sono esattamente gli stati che avremmo ottenuto se avessimo considerato $|+\rangle, |-\rangle$ come rappresentanti di due particelle diverse. In altre parole agli effetti della classificazione degli stati gli indici \pm di spin sono equivalenti alle targhette “virtuali” appese a due specie diverse.

Veniamo ora alla parte dinamica, cioè alla fisica. Se consideriamo una Hamiltoniana indipendente dallo spin e ci limitiamo a osservabili puramente orbitali siamo esattamente nel caso di due particelle diverse già considerato: la restrizione a osservabili indipendenti dallo spin equivale a lasciare separati i tre settori descritti dagli stati (11.154), cioè a dire che il numero di particelle di una data specie si conserva.

Se l'Hamiltoniana, e le osservabili, possono cambiare lo spin possiamo interpretare la cosa in due modi:

- 1) Lo spin è effettivamente un numero quantico della particella e l'interazione semplicemente cambia lo stato.
- 2) L'interazione cambia la specie della particella, fa passare dalla specie $+$ alla specie $-$. Tutto prosegue come prima ma non dobbiamo imporre vincoli sullo spazio degli stati.

La seconda interpretazione sembra alquanto artificiale ma è in linea di principio equivalente alla prima. È interessante che anche nell'esempio della coppia pn avremmo ottenuto qualcosa di analogo se avessimo considerato operatori o termini dell'Hamiltoniana capaci di scambiare le due particelle: questo è proprio quello che succede se si allarga il quadro, tenendo conto delle interazioni con altre particelle è possibile trasformare un protone in un neutrone o viceversa, è quello che ad esempio accade nel decadimento beta del neutrone. Il motivo per cui l'interpretazione 1) ci appare più naturale per il caso dello spin mentre l'interpretazione 2) ci appare più naturale nel caso del decadimento del neutrone è in parte geometrico ed in parte dovuto al modo di fare le misure sulle particelle.

11.10.6 Aspetto geometrico.

Da scrivere

Riassunto: Particella elementare come rappresentazione irriducibile del gruppo di Galileo (Poincarè).

11.10.7 Stati composti.

Da scrivere

Riassunto: A tutti gli effetti se lo stato fondamentale di un composto è ben separato dagli altri stati, il cluster pu'ò essere assimilato ad una particella elementare, caratterizzata dal suo impulso e dal suo spin.

Appendici e Complementi

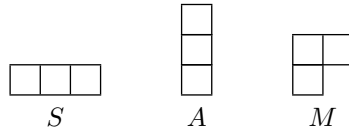
11.A Appendice.

Consideriamo tre particelle, descritte da stati a, b, c diversi fra loro. Applicando le $3!$ permutazioni della terna (a, b, c) allo stato $|a, b, c\rangle$ possiamo costruire la rappresentazione regolare di S_3 . Per rendere l'argomento più chiaro supponiamo di essere in rappresentazione di Schrödinger, indichiamo con $1, 2, 3$ le variabili delle singole particelle, es. x_1, x_2, x_3 , uno stato non simmetrizzato può essere della forma $a_1 b_2 c_3$. Faremo agire la permutazione sugli argomenti $1, 2, 3$.

Le 6 permutazioni di 3 elementi sono

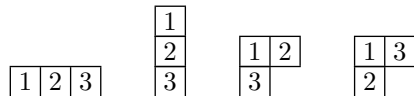
$$(1, 2, 3) \rightarrow (1, 2, 3), (2, 1, 3), (3, 1, 2), (1, 3, 2), (2, 3, 1), (3, 2, 1) \quad (11.155)$$

Come illustrato nel capitolo sulla teoria dei gruppi le rappresentazioni irriducibili di S_N sono in corrispondenza biunivoca con i tableaux di Young, che in questo caso sono



Ad ogni "quadrato" dei tableaux di Young è associata una delle N variabili, abbiamo quindi la disposizione di N oggetti nelle varie caselle. Le funzioni associate ad ogni tableau di Young si ottengono simmettizzando sulle linee e antisimmettizzando sulle colonne. La decomposizione della rappresentazione regolare avviene tramite i tableaux standard che consistono nel distribuire le variabili in ordine crescente sulle righe e sulle colonne.

I tableaux standard associati sono



Le corrispondenti funzioni, con notazione abbreviata, dove $a_1 \equiv a(x_1)$ etc.

Per ottenere, ad esempio, la funzione associata al primo tableau di tipo misto, occorre effettuare la seguente operazione:

$$H_1 = (1 - P_{1,3})(1 + P_{1,2})a_1 b_2 c_3$$

dove P_{ij} è lo scambio fra le variabili i e j . Per il secondo tableau misto

$$X_1 = (1 - P_{1,2})(1 + P_{1,3})a_1 b_2 c_3$$

Si ottengono così le funzioni:

$$\Psi_S = a_1 b_2 c_3 + a_2 b_1 c_3 + a_3 b_1 c_2 + a_1 b_3 c_2 + a_2 b_3 c_1 + a_3 b_2 c_1$$

$$\Psi_A = a_1 b_2 c_3 - a_2 b_1 c_3 + a_3 b_1 c_2 - a_1 b_3 c_2 + a_2 b_3 c_1 - a_3 b_2 c_1$$

$$H_1 = -a_3 b_2 c_1 - a_2 b_3 c_1 + a_2 b_1 c_3 + a_1 b_2 c_3$$

$$= c_3(a_2 b_1 + a_1 b_2) - c_1(a_3 b_2 + a_2 b_3)$$

$$X_1 = a_3 b_2 c_1 - a_3 b_1 c_2 - a_2 b_1 c_3 + a_1 b_2 c_3$$

A partire da ognuna di queste le permutazioni del gruppo generano le rappresentazione irriducibili in cui si decompone la rappresentazione regolare.

Applicando, ad esempio, la permutazione $(1, 2, 3) \rightarrow (2, 1, 3)$ ad H_1 si genera la nuova funzione

$$H_2 = -a_3 b_1 c_2 - a_1 b_3 c_2 + a_2 b_1 c_3 + a_1 b_2 c_3$$

Mentre applicando la permutazione $(1, 2, 3) \rightarrow (3, 1, 2)$ a X_1 si genera

$$X_2 = -a_2 b_3 c_1 + a_3 b_1 c_2 - a_1 b_3 c_2 + a_2 b_1 c_3$$

Con un pò di pazienza si possono applicare di seguito tutte le permutazioni (11.155) ed ottenere la tabella

$(1, 2, 3) \rightarrow$	$(1, 2, 3)$	$(2, 1, 3)$	$(3, 1, 2)$	$(1, 3, 2)$	$(2, 3, 1)$	$(3, 2, 1)$
$\Psi_S \rightarrow$	Ψ_S	Ψ_S	Ψ_S	Ψ_S	Ψ_S	Ψ_S
$\Psi_A \rightarrow$	Ψ_A	$-\Psi_A$	Ψ_A	$-\Psi_A$	Ψ_A	$-\Psi_A$
$H_1 \rightarrow$	H_1	H_2	$-H_2$	$H_1 - H_2$	$-H_1 + H_2$	$-H_1$
$H_2 \rightarrow$	H_2	H_1	$H_1 - H_2$	$-H_2$	$-H_1$	$-H_1 + H_2$
$X_1 \rightarrow$	X_1	$-X_1$	X_2	$-X_2$	$-X_1 - X_2$	$X_1 + X_2$
$X_2 \rightarrow$	X_2	$X_1 + X_2$	$-X_1 - X_2$	$-X_1$	X_1	$-X_2$

dove appunto si verifica che Ψ_S, Ψ_A sono rappresentazioni unidimensionali, mentre H_1, H_2 e X_1, X_2 formano le due rappresentazioni di dimensione 2 in cui si decompone la rappresentazione regolare, corrispondenti alla simmetria mista M dei tableaux di Young.

Per semplificare la discussione seguente supponiamo ora che gli stati a, b, c siano ortonormali. I 6 stati possibili possono essere utilmente espressi tramite le combinazioni simmetriche e antisimmetriche dei vettori a, b , facciamo questo passaggio perchè ci interesserà indagare la simmetria "residua" quando una delle particelle, la c ad esempio, disaccoppia, quindi conviene classificare le cose secondo la simmetria del sistema risultante. Usando l'ortogonalità di a, b, c possiamo costruire 6 stati normalizzati

$$E_1 = c_1 \frac{1}{\sqrt{2}}(a_2 b_3 + a_3 b_2) \quad E_2 = c_2 \frac{1}{\sqrt{2}}(a_3 b_1 + a_1 b_3) \quad E_3 = c_3 \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 b_2 + a_2 b_1)$$

$$F_1 = c_1 \frac{1}{\sqrt{2}}(a_2 b_3 - a_3 b_2) \quad F_2 = c_2 \frac{1}{\sqrt{2}}(a_3 b_1 - a_1 b_3) \quad F_3 = c_3 \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 b_2 - a_2 b_1)$$

Notiamo che questa base è anche ortonormale se i vettori a, b, c sono ortogonali. I vettori H_i, X_i , normalizzati, sono

$$H_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_3 - E_1)$$

$$H_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_3 - E_2)$$

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{8}}(2F_3 + (E_1 - F_1) - (E_2 + F_2))$$

$$X_2 = \frac{1}{\sqrt{8}}(2F_2 - (E_1 + F_1) + (E_3 - F_3))$$

$$\langle H_1 | H_2 \rangle = \frac{1}{2} \quad \langle X_1 | X_2 \rangle = -\frac{1}{2}$$

$$\langle X_1 | H_1 \rangle = -\frac{1}{4} \quad \langle X_1 | H_2 \rangle = \frac{1}{4} \quad \langle X_2 | H_1 \rangle = \frac{1}{2} \quad \langle X_2 | H_2 \rangle = \frac{1}{4}$$

Questa decomposizione va bene per quanto riguarda S_3 ma è meglio usare una base che renda i sottospazi H e X ortogonali. Dalle relazioni precedenti si ha che i vettori

$$K_1 = X_1 + \frac{1}{2}(H_1 - H_2) \quad K_2 = X_2 - \frac{1}{2}H_1$$

sono ortogonali ai vettori H_1, H_2 e, sempre con un pò di pazienza, si verifica che hanno le stesse regole di trasformazione dei X_i sotto permutazioni, cioè la tabella precedente è identica se si sostituiscono i vettori X_i con K_i . Esprimendo i nuovi vettori in termini di E_i, F_i si ottiene, normalizzando:

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{1}{\sqrt{6}} (2F_3 - F_1 - F_2) \\ K_2 &= \frac{1}{\sqrt{6}} (2F_2 - F_1 - F_3) \\ \langle K_1 | K_2 \rangle &= -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

È ora esplicita l'ortogonalità rispetto a H_1, H_2 .

Usando H_1 ed il vettore ortogonale $H_2 - (H_2 \cdot H_1)H_1$, e analogamente per K , i proiettori sugli spazi generati dai vettori H e K si scrivono

$$\begin{aligned} P_H &= \frac{4}{3} |H_1\rangle\langle H_1| + \frac{4}{3} |H_2\rangle\langle H_2| - \frac{2}{3} |H_1\rangle\langle H_2| - \frac{2}{3} |H_2\rangle\langle H_1| \\ P_K &= \frac{4}{3} |K_1\rangle\langle K_1| + \frac{4}{3} |K_2\rangle\langle K_2| + \frac{2}{3} |K_1\rangle\langle K_2| + \frac{2}{3} |K_2\rangle\langle K_1| \end{aligned}$$

Supponiamo di avere preparato uno stato di tipo H_1 (ricordiamo che una qualunque combinazione lineare di H_1, H_2 deve dare gli stessi risultati per osservabili simmetriche).

Facciamo vedere innanzitutto che se la particella c è disaccoppiata questo corrisponde effettivamente ad uno stato a simmetria definita di 2 particelle, simmetrico. Uno stato simmetrico con una terza particella fattorizzata sarebbe, in assenza di simmetrizzazione sotto S_3 , del tipo $\tilde{s}\gamma$, dove \tilde{s} è della forma

$$\tilde{s}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)$$

Con questo si possono costruire stati \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 . La probabilità di trovare lo stato \tilde{s} è allora

$$\begin{aligned} P_{\tilde{s}} &= \frac{1}{2} \text{Tr}(P_{\tilde{H}} |H_1\rangle\langle H_1|) = \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{4}{3} |\langle H_1 | \tilde{H}_1 \rangle|^2 + \frac{4}{3} |\langle H_1 | \tilde{H}_2 \rangle|^2 + \frac{4}{3} \langle H_1 | \tilde{H}_1 \rangle \langle H_1 | \tilde{H}_2 \rangle \right] \end{aligned} \quad (11.156)$$

ricordiamo infatti che le osservabili devono essere simmetriche, il proiettore $P_{\tilde{H}}$ è appunto invariante sotto permutazioni, è l'identità nel sottospazio generato da \tilde{H}_1, \tilde{H}_2 . La (11.156) è espressione del fatto che con statistica mista la misura massimale non riduce ad uno spazio unidimensionale, qui in effetti è un proiettore su uno spazio a 2 dimensioni. Il fattore 1/2 è la normalizzazione del proiettore, cioè $\text{Tr}(1)$.

Supponiamo come nel caso antisimmetrico trattato nel testo che c sia una funzione d'onda localizzata all'esterno della regione di interesse, e costruiamo gli stati nella forma

$$\tilde{E}_1 = \Theta_i \tilde{s}$$

sommiamo poi sui vari Θ che costituiscono una base per la funzione c .

I prodotti si calcolano facilmente perchè, ad esempio, per ragioni di supporto

$$\langle E_1 | \tilde{E}_2 \rangle = \langle E_1 | \tilde{E}_3 \rangle \dots = 0$$

quindi:

$$\langle H_1 | \tilde{H}_1 \rangle = \langle s | \tilde{s} \rangle \quad \langle H_1 | \tilde{H}_2 \rangle = \frac{1}{2} \langle s | \tilde{s} \rangle$$

ed infine dalla (11.156)

$$P_{\tilde{s}} = \frac{1}{2} \frac{4}{3} (\langle s | \tilde{s} \rangle)^2 \left(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \right) = (\langle s | \tilde{s} \rangle)^2 \quad (11.157)$$

che è esattamente il risultato aspettato.

Ancora più importante è assicurarsi che non si misuri uno stato antisimmetrico. Il motivo è questo: costruiamo uno stato $\tilde{a}\gamma$, dove \tilde{a} è antisimmetrico e costruiamo gli stati \tilde{K} corrispondenti. Dobbiamo calcolare

$$P_{\tilde{s}} = \frac{1}{2} \text{Tr}(P_{\tilde{K}} |H_1\rangle \langle H_1|) \quad (11.158)$$

Le semplificazioni per i supporti valgono ancora, quindi, ad esempio, l'unico tipo di prodotto che potrebbe essere non nullo è

$$\begin{aligned} \langle E_1 | \tilde{F}_1 \rangle &= \frac{1}{2} (\gamma \cdot c) (a_2 b_3 + a_3 b_2) \cdot (\alpha_2 \beta_3 - \alpha_3 \beta_2) = \\ &= (\gamma \cdot c) ((a\alpha)(b\beta) - (a\beta)(b\alpha) + (a\beta)(b\alpha) - (a\alpha)(b\beta)) = 0 \end{aligned}$$

Quindi tutti i prodotti scalari si annullano e $P_{\tilde{a}} = 0$. Questo è un punto importante: significa che lo stato H_1 effettivamente localmente si comporta come un normale stato simmetrico. Questo è il motivo per cui la possibilità di queste statistiche non è platealmente falsificata dall'esperienza: trascurando le correlazioni con il resto la statistica può essere approssimativamente quella standard. Lo stesso discorso vale per gli stati K , quindi gli elettroni in un atomo possono, anche in questo ambito generalizzato, seguire la statistica di Fermi-Dirac e obbedire al principio di Pauli. Purtroppo potrebbero esistere degli effetti osservabili. Infatti l'evoluzione temporale del sistema non ha regole di selezione che impediscono di passare da stati di tipo H a stati di tipo K : appartengono a rappresentazioni equivalenti del gruppo delle permutazioni. Se nell'Hamiltoniana di evoluzione c'è un termine piccolo, diciamo di ordine η , che connette le due rappresentazioni allora con probabilità η^2 uno stato H si può trasformare in uno stato K e cambiare la statistica locale. È questa la logica con cui sono stati fatti esperimenti per misurare possibili violazioni del postulato di (anti)simmetrizzazione, i risultati negativi pongono un limite al parametro di mescolamento η .

11.B Elementi di matrice per stati ad N particelle.

Raccogliamo in questa appendice i calcoli relativi alla forma degli elementi di matrice di operatori che agiscono su stati di N particelle. tratteremo per esteso il caso bosonico, che è più complicato dal punto di vista combinatorio.

11.B.1 Bosoni.

Effettueremo i calcoli in rappresentazione di Schrödinger. Chiamiamo q_i l'insieme delle coordinate della particella i -esima, queste includono le coordinate cartesiane x_i , ed eventualmente le coordinate che specificano lo stato di spin. Numeriamo gli stati possibili per una singola particella, $1, 2, \dots$. Ad esempio uno stato, non simmetrizzato, di tre particelle può avere la forma

$$\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\psi_2(q_3)$$

e rappresenta una particella, la 1, nello stato 1, e due particelle, la 2 e la 3, nello stato 2. Una base per gli stati, non simmetrizzati, di N particelle è costruita dicendo quante particelle si trovano nello stato 1, quante nello stato 2 etc. Consideriamo uno stato del tipo

$$|n_1, n_2, \dots\rangle_0 = \psi_1(q_1)\psi_1(q_2) \dots \psi_2(q_{n_1+1}) \dots \quad (11.159)$$

cioè in cui le prime n_1 particelle sono nello stato 1, le successive n_2 nello stato 2 etc. (siccome le particelle sono identiche questa è semplicemente una scelta del nome delle coordinate). Il suffisso nel ket, $|\rangle_0$, sta ad indicare che lo stato **non è simmetrizzato**.

Cosideriamo ora il caso dei bosoni. il vettore simmetrizzato corrispondente a (11.159) è

$$|n_1, n_2 \dots\rangle = C\mathcal{S}|n_1, n_2 \dots\rangle_0 \quad (11.160)$$

dove \mathcal{S} è l'operatore di simmetrizzazione:

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_P P \quad (11.161)$$

P sono le permutazioni, che intenderemo agire sulle coordinate q_i , lasciando invariato l'ordine degli stati. C è una costante di normalizzazione che andiamo a determinare. Usando il fatto che \mathcal{S} è un proiettore, quindi $\mathcal{S}^\dagger = \mathcal{S}$, $\mathcal{S}^2 = \mathcal{S}$ abbiamo

$$\langle n_1, n_2 \dots | n_1, n_2 \dots \rangle = C^2 \cdot {}_0\langle n_1, n_2 \dots | \mathcal{S}^\dagger \mathcal{S} | n_1, n_2 \dots \rangle_0 = C^2 \cdot {}_0\langle n_1, n_2 \dots | \mathcal{S} | n_1, n_2 \dots \rangle_0$$

Nel prodotto scalare a destra devono comparire le stesse funzioni dello stato a sinistra, altrimenti il prodotto è nullo, quindi fra tutte le permutazioni, e uniche a dare un risultato non nullo sono quelle che mandano in se stessi gli insiemi delle n_1 , n_2 coordinate separatamente, cioè gli elementi del gruppo S_N che lasciano invariato il vettore $|n\rangle_0$, e queste sono

$$n_1! n_2! \dots$$

cioè le permutazioni di ogni sottinsieme $\{n_i\}$ di coordinate. Il sottogruppo relativo si chiama gruppo di isotropia del vettore $|n\rangle_0$, lo indicheremo se necessario con S_N^0 . Si ha dunque:

$$\langle n_1, n_2 \dots | n_1, n_2 \dots \rangle = C^2 \frac{n_1! n_2! \dots}{N!}$$

Gli stati normalizzati sono quindi

$$|n_1, n_2 \dots\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}} \mathcal{S} |n_1, n_2 \dots\rangle_0 \quad (11.162)$$

Lo stesso ragionamento mostra che dati due vettori con un diverso numero di interi: n'_1, \dots, n'_k, \dots , questi sono ortogonali. Quindi una base ortonormale per lo spazio simmetrico di N particelle è data dai vettori della forma (11.162), ogni elementi della base corrisponde ad una diversa decomposizione del numero N in somma di interi

$$N = n_1 + n_2 + \dots + n_k \dots$$

Come è noto dalla Meccanica Statistica, v. es. [12], se si ha un numero finito di stati, G , per la singola particella, il numero di stati possibili, per N particelle, è

$$\frac{(G + N - 1)!}{(G - 1)! N!} \quad (11.163)$$

che in questo caso è la dimensione dello spazio di Hilbert.

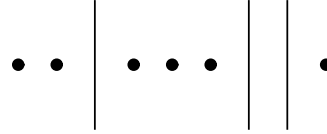
Nota 1. Fra tutte le permutazioni di stati possiamo distinguere quelle che cambiano gli indici distinti, 1 e 3 ad esempio, e quelle che agiscono all'interno dello stesso tipo di stati, appunto il sottogruppo S_N^0 delle permutazioni che lasciano invariante $|n\rangle_0$, e scrivere ogni permutazione come il prodotto di una permutazione di S_n^0 per una che invece cambia gli stati (è l'operazione di passaggio a quoziente per il

gruppo; S_N/S_N^0). La somma sulle permutazioni di S_N^0 dà semplicemente un multiplo $(n_1! n_2! \dots)$ dello stato iniziale, quindi la (11.162) si può anche scrivere

$$\sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{N!}} \sum_{P'} |n_1, n_2 \dots\rangle_0 \quad (11.164)$$

dove $\{P'\}$ è l'insieme delle permutazioni che cambiano gli stati. Lo stesso oggetto quindi si può scrivere in due modi diversi. Al solito la permutazione può essere intesa sulle variabili o sugli stati. Nel testo [11], ad esempio, viene utilizzata la scrittura (11.164), e le permutazioni sono fatte agire sugli stati. Abbiamo fatto questa annotazione per rilevare che la costante di normalizzazione appare in forma esattamente invertita (ma ricordiamo che nella eq. (11.162) c'è un fattore $1/N!$ nella definizione di \mathcal{S}). La scrittura (11.164) è più elegante e compatta ma abbiamo preferito usare la (11.162) per rendere chiari i vari fattori combinatori nel calcolo degli elementi di matrice.

Nota 2. Per il lettore che non ricordasse l'argomento che porta alla (11.163): si tratta di disporre N oggetti in G "cassetti", gli stati appunto. Una disposizione possibile può essere rappresentata da N palline e $G - 1$ pareti divisorie, come in figura, il primo e l'ultimo cassetto sono gli spazi a sinistra e a destra della prima e dell'ultima parete. In figura sono rappresentati 4 stati e 6 particelle, con disposizione (2,3,0,1), cioè 2 particelle nel primo stato, 3 nel secondo, 0 nel terzo e 1 nel quarto.



Il numero di disposizioni si trova prendendo $G + N - 1$ oggetti: di questi se ne scelgono $G - 1$ come pareti, il resto come stati, occorre quindi scegliere $G - 1$ oggetti su N , e questo si può fare nel numero di modi indicato nella (11.163).

Passiamo ora agli elementi di matrice. Per N particelle ci possono essere operatori che agiscono su ogni particella separatamente, come ad esempio l'energia cinetica, l'energia potenziale in campo esterno etc., oppure operatori che coinvolgono due particelle contemporaneamente, ad esempio l'energia elettrostatica per ogni coppia di elettroni, o tre particelle, etc. In ogni caso *questi operatori sono simmetrici*, perchè stiamo considerando particelle identiche.

Operatori ad 1 particella.

L'operatore generale è della forma

$$F^{(1)} = \sum_{i=1}^N f_i \equiv \sum_{i=1}^N f(q_i) \quad (11.165)$$

Consideriamo innanzitutto gli elementi di matrice diagonali

$$\langle n_1, n_2 \dots | F^{(1)} | n_1, n_2 \dots \rangle \quad (11.166)$$

Con la stessa decomposizione usata nel dimostrare la (11.162):

$$\langle n_1, n_2 \dots | F^{(1)} | n_1, n_2 \dots \rangle = C_L \langle n_1, n_2 \dots | F^{(1)} | n_1, n_2 \dots \rangle$$

C_L è la costante di normalizzazione dello stato di sinistra, chiameremo C_R la costante di normalizzazione dello stato di destra, che in questo caso è uguale. Consideriamo l'addendo $f(q_1)$ nell'operatore che agisce, a sinistra, sulla funzione $\psi_1(q_1)$. Nello stato a destra tutte le funzioni ψ_2, ψ_3 etc. non vengono toccate, e nel prodotto scalare contribuiscono col solito fattore $n_2! n_3! \dots$. Il fattore $1/N!$ nella definizione di \mathcal{S} si cancella anch'esso. Rimane perciò

$$\int \psi_1^*(q_1) \dots \psi_1^*(q_{n_1}) f(q_1) \sum_P \psi_1(q_1) \dots \psi_1(q_{n_1})$$

Una variabile q_1 deve essere scelta a destra, e si può fare in n_1 modi diversi, le rimanenti $n - 1$ variabili fanno prodotto scalare con il vettore a sinistra dando un fattore $(n_1 - 1)!$ che cancella, parzialmente il denominatore, resta a questo punto:

$$\frac{1}{n_1} \cdot (\#scelte) \int \psi_1^*(q_i) f(q_1) \psi_1(q_1) = \frac{1}{n_1} \cdot n_1 f_{11} = f_{11}$$

Lo stesso calcolo vale per tutte le n_1 variabili che compaiono nei primi n_1 stati, che quindi, in totale, contribuiscono con $n_1 f_{11}$. Possiamo ora considerare gli addendi di $F^{(1)}$ che contengono le variabili del secondo gruppo, daranno un contributo $n_2 f_{22}$ etc. In totale

$$\langle n_1, n_2 \dots | F^{(1)} | n_1, n_2 \dots \rangle = \sum_i n_i \langle i | f | i \rangle \quad (11.167)$$

È questo, ad esempio, il caso che si presenta se i ket di singola particella sono autostati dell'Hamiltoniana di singola particella e l'operatore $F^{(1)}$ è l'Hamiltoniana *libera* del sistema:

$$H = h_1 + h_2 + \dots h_N \quad (11.168)$$

La (11.167) dice che per particelle libere l'energia totale è la somma delle energie delle singole particelle.

Consideriamo ora gli elementi di matrice fuori diagonale. Gli elementi di matrice di singola particella possono far cambiare stato solo ad una particella, quindi l'elemento di matrice generico è

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_k - 1 \dots | F^{(1)} | n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_k \dots \rangle \quad (11.169)$$

d'ora in poi scriveremo solo i numeri di occupazione che cambiano nella transizione. Operando nel solito modo ci si riduce a

$$C_L \langle n_i n_k - 1 | F^{(1)} | n_i - 1, n_k \rangle$$

C_L è la costante di normalizzazione dello stato di sinistra. Chiamiamo y le variabili che si riferiscono a questi gruppi e ordiniamole di seguito, sono $n_i + n_k - 1$: $y_1 \dots y_{n_i}$, $y_{n_i+1} \dots y_{n_i+n_k-1}$. Uno degli stati $\psi_{n_i}(y_i)$ deve cambiare, siccome tutto il resto è simmetrico possiamo dire che cambia lo stato con variabile y_{n_i} moltiplicando il risultato per n_i ⁹. A questo elemento di matrice contribuisce quindi solo $f(y_{n_i})$. Al solito tutti i prodotti scalari che si riferiscono ad altre variabili, oltre alle y , danno il fattore di normalizzazione, resta perciò:

$$\frac{1}{(n_i - 1)!(n_k - 1)!} \sqrt{\frac{1}{n_i n_k}} n_i \int \psi_i^*(y_1) \dots \psi_i^*(y_{n_i}) \psi_k^*(y_{n_i+1}) \dots \psi_k^*(y_{n_i+n_k-1}) \\ f(y_{n_i}) \sum_P \psi_i(y_1) \dots \psi_i(y_{n_i-1}) \psi_k(y_{n_i}) \dots \psi_k(y_{n_i+n_k-1})$$

La variabile y_{n_i} , che è quella su cui agisce la funzione f , deve quindi passare da una variabile relativa ad uno stato ψ_1 a una variabile relativa ad uno stato ψ_2 . Ci sono n_k modi di scegliere questa variabile nell'insieme delle funzioni ψ_2 del ket nell'elemento di matrice. Una volta fatta questa scelta le rimanenti $n_i + n_k - 2$ variabili danno il contributo

$$(n_i - 1)!(n_k - 1)!$$

mentre la variabile y_{n_i} dà l'elemento di matrice f_{ij} . Raccogliendo i vari contributi si ha allora, per l'elemento di matrice:

$$\sqrt{\frac{1}{n_i n_k}} n_i n_k f_{ik} = \sqrt{n_i n_k} f_{ik}$$

e quindi

$$\langle n_i, n_k - 1 | F^{(1)} | n_i - 1, n_k \rangle = \sqrt{n_i n_k} f_{ik} \quad (11.170)$$

⁹La scelta dell'ultima variabile della lista è fatta semplicemente per rendere più evidente il passaggio successivo, non ha significati particolari.

Operatori a due particelle.

Il più generale operatore simmetrico a due particelle è della forma

$$F^{(2)} = \sum_{a < b} f(q_a, q_b) \quad \text{con } f \text{ simmetrica} \quad (11.171)$$

Si noti che nella (11.171) a somma è fatta **sulle coppie ordinate** di particelle. Il prototipo della (11.171) è l'energia potenziale elettrostatica:

$$\sum_{a < b} \frac{1}{|\mathbf{x}_a - \mathbf{x}_b|}$$

L'operatore $F^{(2)}$ agisce su due particelle quindi al massimo due di queste possono cambiare stato. Ci sono tre tipi di elementi di matrice:

- 1) Quelli in cui nessuna particella cambia stato, questi sono gli elementi di matrice diagonali nel linguaggio del numero di occupazione degli stati.
- 2) Quelli in cui una sola particella cambia stato.
- 3) Quelli in cui due particelle cambiano stato.

Cominciamo dal calcolo degli elementi di matrice diagonali.

Elementi di matrice diagonali.

Occorre esprimere esplicitamente

$$\langle n_1, n_2, \dots | F^{(2)} | n_1, n_2, \dots \rangle \quad (11.172)$$

Seguiamo lo stesso procedimento usato nel caso di singola particella. Sfruttando la simmetria si scrive

$$C_L {}_0 \langle n_1, n_2, \dots | F^{(2)} \mathcal{S} | n_1, n_2, \dots \rangle_0$$

Ricordiamo che negli stati $|\psi\rangle_0$ le variabili sono ordinate in modo crescente, come gli stati, questo semplicemente definisce da che disposizione cominciamo per far agire le permutazioni. Fra gli addendi che costituiscono $F^{(2)}$ ci sono le coppie in cui le variabili si riferiscono allo stesso gruppo di stati, l' i -esimo stato diciamo, e le coppie che si riferiscono a stati diversi, i, j .

Stesso gruppo. Consideriamo gli addendi di $F^{(2)}$ che hanno una coppia di variabili del primo gruppo di n_1 variabili. Ci sono $n_1(n_1 - 1)/2$ coppie di questo tipo, ognuna dà evidentemente lo stesso contributo quindi possiamo chiamare queste variabili y_1, y_2 , la prima e la seconda. Nell'elemento di matrice tutte le variabili che si riferiscono ad altri gruppi, integrate, danno semplicemente il fattore di normalizzazione, resta così da calcolare:

$$\frac{1}{n_1!} \frac{n_1(n_1 - 1)}{2} \int \psi_1^*(y_1) \psi_1^*(y_2) \dots \psi_1^*(y_{n_1}) f(y_1, y_2) \sum_P \psi_1(y_1) \psi_1(y_2) \dots \psi_1(y_{n_1})$$

Le permutazioni rimaste agiscono sulle n_1 variabili rimaste. nel vettore di destra ci sono n_1 modi i scegliere y_1 e, una volta scelto, $n_1 - 1$ modi di scegliere y_2 , le rimanenti variabili danno il fattore di normalizzazione $(n_1 - 2)!$, quindi si ha

$$\frac{1}{n_1!} \frac{n_1(n_1 - 1)}{2} \cdot n_1(n_1 - 1)(n_1 - 2)! \langle 1, 1 | f | 1, 1 \rangle = \frac{n_1(n_1 - 1)}{2} \langle 1, 1 | f | 1, 1 \rangle$$

Lo stesso ragionamento vale per tutti i gruppi, n_2, n_3, \dots . Quindi il contributo all'elemento di matrice per variabili nello stesso gruppo è

$$\sum_i \frac{n_i(n_i - 1)}{2} \langle i, i | f | i, i \rangle \quad (11.173)$$

Gruppi diversi. Supponiamo la prima variabile q_a appartenga al gruppo n_i , la seconda q_b ad un altro gruppo, n_j , necessariamente con $j > i$ perchè le somme in $F^{(2)}$ sono fatte su coppie ordinate. Ci sono $n_i \cdot n_j$ scelte possibili di questo tipo, tutte equivalenti vista la simmetria all'interno di ciascun gruppo. Possiamo scegliere la prima variabile come la prima del gruppo n_i e la seconda come la prima del gruppo n_j . Come fatto precedentemente "mettiamo in fila" le $n_i + n_j$ variabili in gioco. Le variabili al di fuori di questi due gruppi non partecipano all'integrale se non col fattore di normalizzazione, resta perciò da calcolare

$$\frac{1}{n_i!n_j!} n_i n_j \int \psi_i^*(y_1) \psi_i^*(y_2) \dots \psi_j^*(y_{n_i+1}) \dots \psi_j^*(y_{n_i+n_j}) f(y_1, y_{n_i+1}) \sum_P \psi_i(y_1) \psi_i(y_2) \dots \psi_j(y_{n_i+1}) \dots \psi_j(y_{n_i+n_j})$$

La variabile y_1 può essere scelta in n_i modi nel primo gruppo del vettore a destra e la variabile y_{n_i+1} in n_j modi nel secondo gruppo, o viceversa. In entrambi i casi il resto delle variabili fornisce il fattore di normalizzazione $(n_i - 1)!(n_j - 1)!$. Si ha quindi il contributo:

$$\frac{1}{n_i!n_j!} n_i n_j \cdot n_i n_j (n_i - 1)!(n_j - 1)! [\langle ij|f|ij\rangle + \langle ij|f|ji\rangle] = n_i n_j [\langle ij|f|ij\rangle + \langle ij|f|ji\rangle]$$

e questo per ogni coppia i, j , con $i < j$. Sommando questo contributo alla (11.173) l'elemento di matrice diagonale ha la forma

$$\langle n_1, \dots | F^{(2)} | n_1, \dots \rangle = \sum_i \frac{n_i(n_i - 1)}{2} \langle i, i | f | i, i \rangle + \sum_{i < j} (\langle ij|f|ij\rangle + \langle ij|f|ji\rangle) \quad (11.174)$$

Cambiamento di stato di una particella.

L'elemento di matrice da valutare è (scriviamo solo i numeri di occupazione che variano):

$$\langle n_i, n_j - 1 | F^{(2)} | n_i - 1, n_j \rangle \quad (11.175)$$

Usando la simmetria si può ricavare l'espressione (11.175) nella forma

$$C_L C_R \langle n_i, n_j - 1 | F^{(2)} \mathcal{S} | n_i - 1, n_j \rangle_0$$

Una variabile del gruppo n_i deve partecipare alla transizione, quindi una delle due variabili q_a, q_b deve essere una di queste. Diciamo q_a . Ci sono n_i possibili scelte, tutte equivalenti, per il nome di questa variabile. La seconda variabile deve appartenere ad un gruppo n_k , che può coincidere o no con n_i . Ci sono tre casi distinti, che analizzeremo separatamente.

$k \neq i, j$ La prima variabile, diciamo y_1 , deve comparire nel gruppo n_j , una volta scelta, con n_j possibilità, le altre variabili del gruppo producono solo il fattore di normalizzazione $(n_j - 1)!$. La variabile y_2 appartiene al gruppo n_k , ci sono n_k possibilità di scelta sul vettore di sinistra ed altrettante su quello di destra, una volta selezionata la variabile, le altre producono il fattore di normalizzazione $(n_k - 1)!$. l'elemento di matrice di f che abbiamo selezionato ha la forma

$$\langle i, k | f | j, k \rangle \equiv \int \psi_i^*(y_1) \psi_k^*(y_2) f(y_1, y_2) \psi_j(y_1) \psi_k(y_2)$$

L'altra possibilità è che la variabile y_1 sia nel gruppo n_k , a destra, e la variabile y_2 nel gruppo n_j , e questo seleziona l'elemento di matrice

$$\langle i, k | f | k, j \rangle \equiv \int \psi_i^*(y_1) \psi_k^*(y_2) f(y_1, y_2) \psi_k(y_1) \psi_j(y_2)$$

In totale abbiamo perciò

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(n_i - 1)!(n_j - 1)!n_k!} \sqrt{\frac{1}{n_i n_j}} n_i n_j n_k^2 (n_i - 1)!(n_j - 1)!(n_k - 1)! [\langle i, k|f|j, k \rangle + \langle i, k|f|k, j \rangle] \\ &= \sqrt{n_i n_j} n_k (\langle i, k|f|j, k \rangle + \langle i, k|f|k, j \rangle) \end{aligned}$$

Bisogna ora sommare su $k \neq i, j$. Notiamo che guardando lo stato iniziale questo significa sommare su **tutti** gli stati occupati, eccetto lo stato j della particella che fa la transizione.

$k = j$ La scelta della variabile y_1 di nuovo ha n_i possibilità sullo stato di sinistra e n_j su quello di destra, per un totale di un fattore $n_i n_j$. In questo caso la variabile y_2 ha $(n_j - 1)$ possibilità di scelta a sinistra (tante quante sono le variabili) e $n_j - 1$ a destra, perchè una delle variabili del gruppo è già stata selezionata da y_1 . L'elemento di matrice coinvolto è

$$\langle i, j|f|j, j \rangle \equiv \int \psi_i^*(y_1) \psi_j^*(y_2) f(y_1, y_2) \psi_j(y_1) \psi_j(y_2)$$

e raccogliendo i vari termini:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(n_i - 1)!(n_j - 1)!} \sqrt{\frac{1}{n_i n_j}} n_i n_j (n_j - 1)^2 (n_i - 1)!(n_j - 2)! \langle i, j|f|j, j \rangle \\ &= \sqrt{n_i n_j} (n_j - 1) \langle i, j|f|j, j \rangle \end{aligned}$$

$k = i$ La scelta della variabile y_1 di nuovo ha n_i possibilità sullo stato di sinistra e n_j su quello di destra, per un totale $n_i n_j$ possibilità. In questo caso la variabile y_2 ha $n_i - 1$ possibilità di scelta a sinistra perchè una delle variabili del gruppo è già stata selezionata da y_1 , ed $n_i - 1$ a destra, tante quante sono le variabili. L'elemento di matrice selezionato è

$$\langle i, i|f|j, i \rangle \equiv \int \psi_i^*(y_1) \psi_i^*(y_2) f(y_1, y_2) \psi_j(y_1) \psi_i(y_2)$$

Quindi

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(n_i - 1)!(n_j - 1)!} \sqrt{\frac{1}{n_i n_j}} n_i n_j (n_i - 1)^2 (n_i - 2)!(n_j - 1)! \langle i, j|f|j, j \rangle \\ &= \sqrt{n_i n_j} (n_i - 1) \langle i, i|f|j, i \rangle \end{aligned}$$

In totale il contributo fuori diagonale è

$$\begin{aligned} \langle n_i, n_j - 1|F^{(2)}|n_i - 1, n_j \rangle &= \sqrt{n_i n_j} \sum_{k \neq i, j} n_k (\langle i, k|f|j, k \rangle + \langle i, k|f|k, j \rangle) \\ &+ \sqrt{n_i n_j} (n_j - 1) \langle i, j|f|j, j \rangle + \sqrt{n_i n_j} (n_i - 1) \langle i, i|f|j, i \rangle \quad (11.176) \end{aligned}$$

Cambiamento di stato di due particelle.

Consideriamo il caso in cui n_k, n_l diminuiscono di una unità, mentre $n_i - 1, n_j - 1$ aumentano di una unità, la notazione è simile a quella usata nel calcolo dell'elemento di matrice di singola particella. Possiamo sempre supporre $i < j, k < l$, è solo il nome che stiamo dando alle variabili. È chiaro che solo le variabili di questi quattro gruppi sono coinvolti nell'elemento di matrice. Siccome le variabili n_i, n_j sono aumentate di 1, queste devono comparire nella coppia q_a, q_b degli argomenti di $F^{(2)}$, ci sono $n_i \cdot n_j$ modi di scegliere questa variabile, quindi dovrebbe essere chiaro che l'elemento di matrice è, mettendo sempre

in fila le variabili:

$$\frac{1}{(n_i - 1)!(n_j - 1)!(n_k - 1)!(n_l - 1)!} \sqrt{\frac{1}{n_i n_j n_k n_l}} n_i n_j \cdot \int \psi_i^*(y_1) \dots \psi_i(y_{n_i}) \psi_j^*(y_{n_i+1}) \dots f(y_{n_i}, y_{n_i+n_j}) \sum_P \psi_i(y_1) \dots \psi_i(y_{n_i-1}) \psi_j \dots$$

La coppia di variabili $y_{n_i}, y_{n_i+n_j}$ deve essere scelta, a destra, o, rispettivamente, nell'insieme n_k, n_l e nell'insieme n_l, n_k , in entrambi i casi ci sono $n_k \cdot n_l$ possibilità. Le altre variabili al solito servono alla normalizzazione e risulta:

$$\langle n_i, n_j, n_k - 1, n_l - 1 | F | n_i - 1, n_j - 1, n_k, n_l \rangle = \sqrt{n_i n_j n_k n_l} [\langle i, j | f | k, l \rangle + \langle i, j | f | l, k \rangle] \quad (11.177)$$

Lasciamo al lettore l'indagine degli altri casi particolari:

$$\langle n_i, n_j, n_k - 2 | F | n_i - 1, n_j - 1, n_k \rangle \quad (11.178a)$$

$$\langle n_i, n_k - 2 | F | n_i - 2, n_k \rangle \quad (11.178b)$$

11.B.2 Fermioni.

Per i fermioni i calcoli sono relativamente più semplici, perchè il numero di occupazione può essere solo 0, 1. Per quanto riguarda il segno delle permutazioni l'unico ruolo che giocano è dare un segno opposto a due elementi di matrice che differiscono per uno scambio. Anche nella notazione si può essere più chiari: basta scivere gli stati che subiscono un cambiamento e omettere di scrivere gli stati con numero di occupazione nullo: negli elementi di matrice si avrà un passaggio da un numero di occupazione 1 nello stato j ad un numero di occupazione 1 nello stato i , se questo è l'unico effetto è inutile specificare che nello stato iniziale non c'erano particelle nello stato i e nello stato finale non ci sono particelle nello stato j .

Quindi si ha

$$|i_1, \dots, i_N\rangle = \sqrt{N!} \mathcal{A} |i_1, \dots, i_N\rangle_0 = \sqrt{\frac{1}{N!}} \sum_P \varepsilon_P |i_1, \dots, i_N\rangle_0 \quad (11.179)$$

ε_P indica il segno della permutazione.

Per gli operatori ad una particella:

$$\langle N | F^{(1)} | N \rangle = \sum_i \langle i | f | i \rangle \quad \text{elementi diagonali} \quad (11.180a)$$

$$\langle i | F^{(1)} | j \rangle = \langle i | f | j \rangle \quad \text{elementi non diagonali} \quad (11.180b)$$

Per gli operatori a due particelle:

$$\langle N | F^{(2)} | N \rangle = \sum_{i < j} (\langle ij | f | ij \rangle - \langle ij | f | ji \rangle) \quad \text{elementi diagonali} \quad (11.181a)$$

$$\langle i | F^{(2)} | j \rangle = \sum_{k \neq i, j} (\langle ik | f | jk \rangle - \langle ik | f | kj \rangle) \quad \text{cambio di 1 stato} \quad (11.181b)$$

$$\langle ij | F^{(2)} | kl \rangle = (\langle ij | f | kl \rangle - \langle ij | f | lk \rangle) \quad \text{cambio di 2 stati} \quad (11.181c)$$

Bibliografia

- [1] M. Born, P. Jordan, W. Heisenberg: *Z. Phys.* **35**, 557 (1926).
- [2] H.A. Bethe, E.E. Salpeter: *Quantum Mechanics of One-And Two-Electron Atoms*, Plenum Publishing Corporation; (1977)
- [3] H.A. Bethe, R. Jackiw: *Intermediate Quantum Mechanics*. Perseus Books, (1986)
- [4] R. Balsa, M. Plo, J.G. Esteve, A.F. Pacheco: *Phys. Rev.* **D28**, 1945 (1983).
- [5] C.L. Pekeris, *Phys. Rev.* **126**, 1470, (1962).
- [6] A. Dalgarno, J.T. Lewis: *Proc. Roy. Soc.* **A233**, 70 (1955).
- [7] L.I. Schiff: *Quantum Mechanics*.
- [8] C.M. Bender, T.T. Wu: *Phys. Rev.* **D7**, 1620 (1973). McGraw-Hill Int. Ed. (1968).
- [9] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Ed. Dover. Cap. XIV.
- [10] A. Messiah, O.W. Greenberg, *Phys.Rev.* **136**, (1964), 249.
- [11] L.D. Landau, E.M. Lifšits: *Meccanica Quantistica, teoria non relativistica*, Corso di Fisica Teorica, Vol.3, Ed. Riuniti.
- [12] L.D. Landau, E.M. Lifšits: *Fisica Statistica*, Corso di Fisica Teorica, Vol.5, Ed. Riuniti.
- [13] W. Pauli: *Phys. Rev.* **58**, (1940), 716.
- [14] W. Pauli: *Z. Physik* **31**, (1925), 765.
- [15] R.P. Feynman, R.B. Leughton, M. Sands: *The Feynman Lectures on Physics*, Vol.3, Addison-Wesley Pub. Company.
- [16] P. Ehrenfest, J.R. Oppenheimer: *Phys. Rev.* **37**, (1931), 333.