# Particelle identiche. Principio di Pauli.

1

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

### Particelle identiche: sommario

Finora: proprietà di particella singola. Volendo ottenere il comportamento di più particelle, è necessario trovare la fdo dell'intero sistema.

- caso di due particelle non interagenti
- concetti classici
- indistinguibilità
- simmetria e antisimmetria
- principio di esclusione di Pauli
- alcune notevoli conseguenze

### Due particelle

Per semplificare gli aspetti formali: consideriamo due sole particelle.

Problema classico: particella a in  $x_1$ , particella b in  $x_2$ , energia potenziale V(x). Si cercano (ad es.) le leggi del moto  $x_1(t), x_2(t)$ .

Problema quantistico: particella a in  $x_1$ , particella b in  $x_2$ , energia potenziale V(x). Si cerca la fdo complessiva  $\Psi(x_1, x_2, t)$  per cui  $|\Psi|^2$  darà la densità di probabilità condizionata di trovare una particella in  $x_1(t)$  e l'altra in  $x_2(t)$ .

3

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

#### Caso classico

Siano date due particelle di massa  $m_1$  e  $m_2$ . In una dimensione, le loro posizioni siano  $x_1$  e  $x_2$ . Se le particelle non sono interagenti, l'energia potenziale è la somma  $V(x_1)+V(x_2)$ . L'energia totale classica è allora:

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V_1(x_1) + V_2(x_2) = E$$

Per conoscere l'evoluzione del sistema basta scrivere le opportune equazioni del moto per le due particelle, che possono essere distinte l'una dall'altra in ogni punto della loro traiettoria.

# Caso quantistico

Per le stesse particelle <u>noninteragenti</u> del caso classico, per cui l'energia è:

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V_1(x_1) + V_2(x_2) = E$$

si suppone che lo stato sia descritto da una certa fdo  $\Psi(x_1, x_2, t)$ . Allora si scrive con immediata analogia (sostituendo ai momenti le loro espressioni in termini di operatori) l'equazione di Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_2^2} + V_1(x_1)\Psi + V_2(x_2)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Similmente alla soluzione generale dell'equazione di Schrödinger, possiamo cercare soluzioni *separabili* (N.B. non è detto ne' che queste soluzioni ci siano, ne' che siano uniche) questa volta per *tre* variabili  $(x_1, x_2, t)$ , e quindi della forma:

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi_a(x_1) \cdot \psi_b(x_2) \cdot f(t)$$

5

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

### Funzione d'onda

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_2^2} + V_1(x_1)\Psi + V_2(x_2)\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Cerchiamo soluzioni separabili, della forma:

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi_a(x_1) \cdot \psi_b(x_2) \cdot f(t)$$

Si trovano le equazioni non dipendenti dal tempo:

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m_{1}}\frac{d^{2}\psi_{a}}{dx_{1}^{2}} + V_{1}(x_{1})\psi_{a} = E_{a}\psi_{a} \qquad -\frac{\hbar^{2}}{2m_{2}}\frac{d^{2}\psi_{b}}{dx_{2}^{2}} + V_{2}(x_{2})\psi_{b} = E_{b}\psi_{b}$$

$$con \quad (E_{a} + E_{b})f = i\hbar\frac{df}{dt} \qquad per cui \qquad f(t) = e^{-i(E_{a} + E_{b})t/\hbar}$$

e infine 
$$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi_a(x_1) \cdot \psi_b(x_2) \cdot e^{-i(E_a + E_b)t/\hbar}$$

Quindi l'evoluzione temporale è data dall'energia totale, ma la distribuzione spaziale è il prodotto di due fdo di particella singola.

# Densità di probabilità

Data la fdo a due particelle:

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \psi_a(x_1) \cdot \psi_b(x_2) \cdot e^{-i(E_a + E_b)t/\hbar}$$

l'interpretazione probabilistica richiede che si specifichi la posizione di ambedue le particelle. Ovvero, la probabilità dP di trovare una particella nell'intervallo  $dx_1$  attorno a  $x_1$  e l'altra nell'intervallo  $dx_2$  attorno a  $x_2$  è:

$$dP = |\Psi(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2 = |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \cdot |\psi_b(x_2)|^2 dx_2$$

che rappresenta proprio la probabilità condizionata dei due eventi distinti.

Come vanno scritte le espressioni per particelle identiche?

7

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

### Particelle identiche vs. distinguibili

Nel caso classico le particelle, anche se identiche, restano comunque *distiguibili*: è sempre possibile seguire l'evoluzione di una delle due.

Questo *non è possibile* nel caso quantistico: una osservazione continua introdurrebbe una perturbazione che cambierebbe il sistema! Se le due particelle sono identiche, non è possibile distinguerle.

Pertanto, nel caso quantistico, se 1 e 2 sono particelle identiche, l'evento "la particella 1 è in  $x_1$  e 2 è in  $x_2$ " deve essere indistinguibile dall'evento "la particella 2 è in  $x_1$  e 1 è in  $x_2$ ".

Ovvero,

le fdo corrispondenti ai due stati devono essere fisicamente indistinguibili

# Fdo di particelle identiche

le fdo corrispondenti ai due stati:

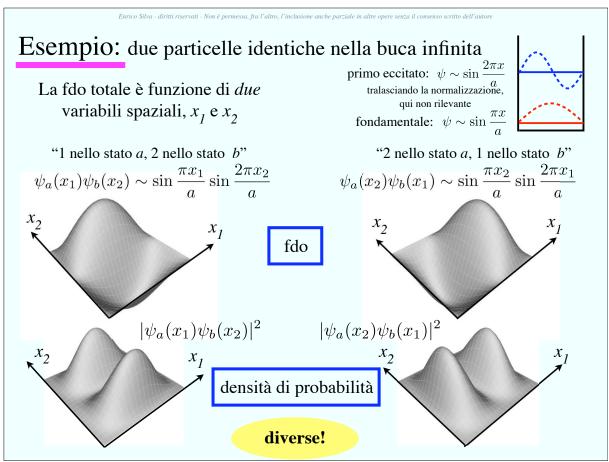
"la particella 1 è nello stato a e la particella 2 è nello stato b"  $\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$ 

"la particella 2 è nello stato a e la particella 1 è nello stato b"  $\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)$ 

devono essere fisicamente indistinguibili.

ma queste due fdo *non* descrivono due particelle indistinguibili. Vediamolo con un esempio.

9



Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

# Particelle identiche: fdo simmetriche e antisimmetriche

"1 nello stato a, 2 nello stato b"  $\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$ 

"2 nello stato a, 1 nello stato b"  $\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)$ 

queste due fdo *non* descrivono due particelle indistinguibili.

le seguenti combinazioni descrivono invece due particelle indistinguibili: ciascuna fdo dà densità di probabilità identica per scambio di particelle.

$$\psi_+(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right]$$
 fdo spazialmente simmetrica

Lo scambio delle due particelle ( $a \bigcirc b$ ) fornisce la stessa identica fdo.

$$\psi_{-}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right]$$
 fdo spazialmente antisimmetrica

Lo scambio delle due particelle ( $a \bigcirc b$ ) fornisce la stessa fdo cambiata di segno (che non influenza la densità di probabilità).

11

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autoro

# Principio di esclusione di Pauli

Consideriamo le fdo simmetrica e antisimmetrica:

$$\psi_{+}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right] \quad \text{fdo spazialmente simmetrica}$$

$$\psi_{-}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right] \text{ fdo spazialmente antisimmetrica}$$

Finora si è ammesso che *a* e *b* potessero indicare stati generici. Ma se *a* e *b* indicano lo stesso stato (ovvero, due particelle nel medesimo stato), *la fdo antisimmetrica svanisce*:

$$\psi_{-}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_a(x_1) \psi_a(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_a(x_1) \right] = 0$$

Due particelle la cui fdo sia antisimmetrica non possono occupare simultaneamente lo stesso stato quantico.

Questo è il Principio di esclusione di Pauli.

### Proprietà di sistemi di particelle identiche

Consideriamo le fdo simmetrica e antisimmetrica:

$$\psi_{+}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right] \quad \text{fdo spazialmente simmetrica}$$

$$\psi_-(x_1,x_2)=rac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2)-\psi_a(x_2)\psi_b(x_1)
ight]$$
 fdo spazialmente antisimmetrica

in generale daranno luogo a densità di probabilità differenti.

Vediamo le peculiarità nell'esempio precedente: due particelle nella buca infinita, occupanti i primi due stati energetici.

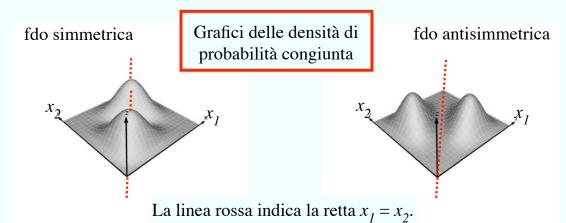
Nota: sono in due stati differenti!

13

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

# Esempio (cont.)

Stesso esempio: due particelle identiche in una buca infinita unidimensionale, collocate su due livelli energetici diversi (primo e secondo).



fdo simmetrica: ho *massimi* della densità di probabilità su  $x_1 = x_2$ .

Le particelle si trovano preferenzialmente nel medesimo punto.

fdo antisimmetrica: ho *minimi* della densità di probabilità su  $x_1 = x_2$ .

Le particelle preferenzialmente si trovano in punti diversi.

!!!

### Forza di "scambio"

Dalla richiesta (quantistica) che le particelle siano indistinguibili, discende che la fdo di un sistema di due particelle identiche sia:

simmetrica oppure antisimmetrica

da questo, discende che particelle con fdo:

simmetrica

antisimmetrica

tendono a avvicinarsi fra loro

tendono a allontanarsi fra loro

(sempre nel senso della densità di probabilità)

#### Nota bene:

poiché si è supposto che le due particelle fossero *non interagenti*: è un fatto del tutto nuovo e esclusivamente quantistico. Non ha alcuna controparte classica. Discende esclusivamente alla richiesta di indistinguibilità.

Tale effetto prende il nome di forza di scambio.

15

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

### Una manifestazione della "forza di scambio"

$$\psi_{+}(x_{1}, x_{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_{a}(x_{1})\psi_{b}(x_{2}) + \psi_{a}(x_{2})\psi_{b}(x_{1}) \right]$$

 ${\it fdo}~spazial mente~simmetrica$ 

$$\psi_{-}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_a(x_2) \psi_b(x_1) \right]$$

fdo spazialmente antisimmetrica

Calcolando la media del quadrato della distanza per le fdo simmetriche e antisimmetriche si ottiene (calcoli sul Griffiths):

$$\left\langle (x_1 - x_2)^2 \right\rangle_{\pm} = \int \psi_{\pm}^* (x_1 - x_2)^2 \psi_{\pm} dx_1 dx_2$$
$$= \left\langle x^2 \right\rangle_a + \left\langle x^2 \right\rangle_b - 2 \left\langle x \right\rangle_a \left\langle x \right\rangle_b \mp 2 \left| \left\langle x \right\rangle_{ab} \right|^2$$

"-2|...|2": simmetriche "+ 2|...|2": antisimm.

dove il pedice indica su quali fdo viene fatto l'integrale.

$$2\left|\int x\psi_a^*(x)\psi_b(x)dx\right|^2$$

ed è significativamente  $\neq 0$  solo se c'è sovrapposizione fra  $\psi_a$  e  $\psi_b$ .

### Commento sulla forza di "scambio"

Il termine responsabile della forza di scambio è  $2\left|\int x\psi_a^*(x)\psi_b(x)dx\right|^2$ 

ed è significativamente  $\neq 0$  solo se c'è sovrapposizione fra  $\psi_a$  e  $\psi_b$ .

anche se, in linea di principio, bisognerebbe simmetrizzare o antisimmetrizzare la fdo di *tutte le particelle identiche dell'universo* (di un medesimo tipo), l'effetto coinvolge solo particelle sufficientemente vicine. Per particelle identiche ma lontane possiamo pensare che siano distinguibili. (questa è l'origine della dizione "forza di scambio")

Per particelle identiche e vicine l'effetto è rilevante (esempio: struttura atomica, struttura elettronica della materia)

17

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

### Fermioni e bosoni

In natura vi sono due soli tipi di particelle:

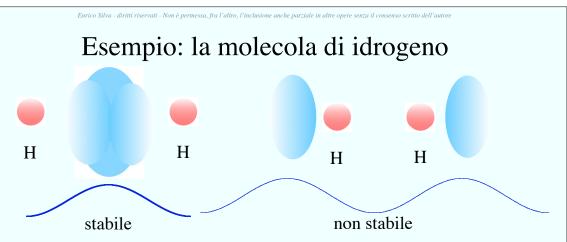
bosoni, fermioni,

che hanno fdo simmetrica che hanno fdo antisimmetrica.

particelle alfa elettrone atomo di He<sup>4</sup> neutrone protone atomo di He<sup>3</sup>

spin intero spin semiintero

Attenzione: la simmetria e antisimmetria deve essere pensata non solo relativamente alle coordinate spaziali, ma tenendo conto di tutte le grandezze (p.es. dello spin)



la curva riporta la densità di probabilità (attenzione: modulo quadro!) di una fdo spazialmente simmetrica (sinistra) o antisimmetrica (destra)

Il sistema è stabile se la fdo degli elettroni ha un picco di densità di probabilità nella regione fra i due atomi di H, in maniera che vi sia carica negativa fra i due ioni positivi: la fdo deve essere *spazialmente simmetrica*.

Poiché gli elettroni sono fermioni, la fdo complessiva deve essere *antisimmetrica*, quindi gli spin devono essere opposti nella configurazione stabile.