

LNF-70/22
25 Maggio 1970

G. Sacerdoti: UN HAMILTONIANO CHE IMPLICA IL
PRINCIPIO DI ESCLUSIONE. -

Nota interna: n. 478
25 Maggio 1970

G. Sacerdoti: UN HAMILTONIANO CHE IMPLICA IL PRINCIPIO DI ESCLUSIONE. -

SOMMARIO. -

In questo lavoro si è ricavata l'espressione esplicita H'_0 di un hamiltoniano che ha per autofunzioni funzioni del tipo $\Psi_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum P(a_1, a_2, \dots, a_n) u_{a_1}(x_1) \dots u_{a_n}(x_n)$ (con $a_1 < a_2 < \dots < a_n$ e $u_i(x)$ funzioni di un set ortonormale completo) gli stessi autovalori E_k di quelli di un normale hamiltoniano H di un sistema di molti corpi interagenti avente come autofunzioni quelle ottenute dalle $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ antisimmetrizzate. La condizione $a_1 < a_2 < \dots < a_n$ equivale al principio di esclusione di Pauli. L'hamiltoniano H'_0 ricavato è esprimibile come $H'_0 = \lim_{\lambda \rightarrow \lambda_{\min}} H'_0(\lambda)$ ove λ è un parametro nume-

rico. Il principio di esclusione potrebbe essere un caso limite in cui $\lambda \rightarrow 0$. Per i bosoni invece l'hamiltoniano valido potrebbe essere quello per cui $\lambda \rightarrow \infty$. Il caso limite dei bosoni potrebbe essere quello dei fotoni. Potrebbero pensarsi particelle intermedie e statistiche valide per quasi fermioni che però in certi stati di elevate energie potrebbero comportarsi come quasi bosoni. Non sono state studiate conseguenze teoriche di questa formulazione del problema dei many bodies né sull'interpretazione di esperienze né sui suggerimenti sui metodi matematici per risolvere problemi che da questa formulazione potrebbero seguire.

GENERALITA'. -

Come è noto la soluzione del problema dei "Many Interacting Fermions Systems" consiste nel trovare le soluzioni antisimmetriche dell'equazione differenziale seguente:

$$(1) \quad H\Psi = E_0\Psi$$

dove

2.

$$(2) \quad H = \sum_j \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{i,j} V(x_i - x_j) + \sum_j U(x_j)$$

Nell'equazione ora scritta si sono trascurati gli spins e le forze di scambio dovute agli spin. Spesso nella formulazione del problema si trascurano i potenziali $U(x_i)$ e nello sviluppo in serie di Fourier del potenziale $V(x_i - x_j)$ si trascura il termine con $q=0$ annullato dalla presenza della carica positiva "uniformemente distribuita" in tutto il volume (q è la periodicità spaziale della componente armonica).

Nelle pagine che seguono ho cercato di formulare il problema dei many bodies in forma diversa dall'usuale. Questo nuovo modo di scrivere le equazioni di Schroedinger nel caso del problema di multicorpi sembra dare suggerimenti per arrivare a giustificare il principio di esclusione come conseguenza della particolare forma dell'Hamiltoniano del sistema: per questo, anche nella incertezza della reale utilità di formulare il problema in modo diverso ai fini di prevedere per via teorica il comportamento dei sistemi di elettroni, ho creduto utile raccogliere quanto esposto nelle pagine seguenti.

IMPOSTAZIONE ANALITICA DEL PROBLEMA. -

Un sistema di n fermioni è descritto nello spazio delle coordinate dalla funzione d'onda

$$(3) \quad \psi_s = \sum_{a_1, a_2, \dots, a_n} \left| u_{a_1}(x_1), u_{a_2}(x_1), \dots, u_{a_n}(x_1) \right| \frac{1}{\sqrt{n!}} P(a_1 a_2 \dots a_n)$$

dove le $u_{a_i}(x)$ costituiscono un sistema ortonormale completo di funzioni.

La più elementare informazione che p . esempio fornisce la funzione d'onda ψ_s è la probabilità $G(x)$ di trovare una particella nell'intorno del punto x , che è data da:

$$(4) \quad G(x) = \iiint dx_1, a_2 \dots dx_n \psi_s^2 \left[\delta(x - x_1) + \delta(x - x_2) \dots \delta(x - x_n) \right] =$$

$$= \sum_{a_1 a_2 a_n} P^2(a_1, a_2 \dots a_n) \left[u_{a_1}^2(x) + u_{a_2}^2(x) \dots u_{a_n}^2(x) \right]$$

Se la funzione d'onda fosse espressa da una funzione non simmetrizzata

$$(5) \quad \psi_N = \sum_{a_1 < a_2 \dots < a_n} u_{a_1}(x_1) u_{a_2}(x_2) \dots u_{a_n}(x_n) P(a_1, a_2, \dots, a_n)$$

la probabilità di trovare una particella nell'intorno del punto x è data da una espressione analoga alla (4). Quindi la antisimmetrizzazione della funzione non cambia in questo caso questa probabilità, che data la perfetta equivalenza tra le particelle, è l'unica rilevabile. La domanda "quale è la probabilità di trovare l'elettrone i -esimo nella cella x ?" non si pone perché nessun elettrone ha stampato l'indice i -esimo. La conoscenza della funzione d'onda non antisimmetrizzata è in grado di fornire la stessa informazione di quella antisimmetrizzata. Premesso questo, possiamo porci il seguente problema: Data l'hamiltoniana H che ci determina gli stati stazionari del sistema descritti da funzioni antisimmetriche ψ_s , quale forma avrà l'hamiltoniana H' che ha per autofunzioni ψ_N del tipo (5) che antisimmetrizzate ci danno le ψ_s ?

Assumiamo come funzioni base il sistema ortonormale di funzioni u_1, u_2, \dots, u_n . La ψ_s generica è del tipo (3) che con una nuova notazione indicheremo nel modo seguente:

$$(6) \quad \psi_s = \frac{P(a_1, a_2, \dots, a_n)}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} u_{a_1}(x_1), u_{a_2}(x_1), \dots, u_{a_n}(x_1) \\ \vdots \\ u_{a_1}(x_n), u_{a_2}(x_n), \dots, u_{a_n}(x_n) \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{P(a_1, a_2, \dots, a_n)}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} u_{a_1}, u_{a_2}, \dots, u_{a_n} \\ \vdots \\ x_1, x_2, \dots, x_n \end{vmatrix} (x)$$

Questa funzione si può ricavare operando opportunamente sulla funzione

$$(7) \quad \psi_N = \sum_{a_1 < a_2 \dots < a_n} P(a_1, a_2, \dots, a_n) u_{a_1}(x_1), u_{a_2}(x_2) \dots u_{a_n}(x_n)$$

(x) - Useremo di seguito questa notazione per indicare il det di Slater corrispondente.

4.

mediante l'operatore S antisimmetrizzatore, e viceversa la funzione ψ_N si può ottenere dalle funzioni ψ_S operando su ψ_S mediante l'operatore R inverso di S.

Affinché sia univocamente determinato R bisogna stabilire un ordine progressivo nelle u_{a_1} . Nel caso di spazio unidimensionale, ove le u siano del tipo $\exp(ia_jx)$, possiamo stabilire una volta per tutte che nei vari termini della (7) sia

$$(8) \quad a_1 \leq a_2, \dots \leq a_n$$

Dalla definizione ora data è facile ricavare le espressioni esplicite di S e R nello spazio delle coordinate e precisamente si può scrivere:

$$(9) \quad S = \sum_{a_1 < a_2 < \dots < a_n}^{\infty} \begin{vmatrix} u_{a_1}, u_{a_2}, \dots, u_{a_n} \\ x_1, x_2, \dots, x_n \end{vmatrix} \int dx'_1 dx'_2 \dots dx'_n u_{a_1}^x(x'_1) u_{a_2}^x(x'_2) \dots u_{a_n}^x(x'_n)$$

$$(10) \quad R = \left[\sum u_{a_1}(x_1) u_{a_2}(x_2) \dots u_{a_n}(x_n) \int dx'_1 dx'_2 \dots dx'_n \begin{vmatrix} u_{a_1}^x, u_{a_2}^x, \dots, u_{a_n}^x \\ x_1, x_2, \dots, x_n \end{vmatrix} \right]$$

Nelle (9) e (10) le sommatorie sono estese a tutte le combinazioni di a_1, a_2, \dots, a_n da $-\infty$ a $+\infty$ con la condizione che sia $a_1 < a_2 < \dots < a_n$.

Possiamo ricavare facendo uso delle (9) e (10) l'espressione di H' che agendo sulle autofunzioni ψ_N del tipo (7) hanno autovalori uguali a quelli determinati dalla equazione $H\psi_S = E_a\psi_S$. Procediamo quindi a ricavare H' . Abbiamo:

$$(11) \quad H\psi_S = E_a\psi_S$$

Possiamo ancora scrivere:

$$(12) \quad R H S R \psi_S = E_a R \psi_S \quad ; \quad H'_0 \psi_N = E_0 \psi_N$$

essendo

$$S R \psi_S = \psi_S \quad e \quad R \psi_S = \psi_N$$

Abbiamo che:

$$(13) \quad R H S = R H_c S + R H_v S = H_c' + H_v'$$

ove gli indici c e v si riferiscono rispettivamente alla parte cinetica e potenziale della hamiltoniana.

Ricaviamo ora l'espressione di H_c' . Si ha, con le notazioni usate precedentemente:

$$H_c' \psi = \sum_{\substack{0 < a_1' \dots r_1' < \infty \\ 0 < a_1'' \dots r_1'' < \infty}} \sum_{\substack{0 < a_2' \dots r_2' < \infty \\ 0 < a_2'' \dots r_2'' < \infty}} \dots \sum_{\substack{0 < a_n' \dots r_n' < \infty \\ 0 < a_n'' \dots r_n'' < \infty}} \int \left| \begin{array}{c} u_{a_1'}^x, u_{a_2'}^x \dots u_{a_n'}^x \\ x_1', x_2' \dots x_n' \end{array} \right| \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

$$(14) \quad \int \dots \int \left[\frac{d}{dx_1'} + \dots + \frac{d^2}{dx_n'} \right] \left| \begin{array}{c} u_{a_1''}^x, u_{a_2''}^x \dots u_{a_n''}^x \\ x_1', x_2' \dots x_n' \end{array} \right| \frac{1}{\sqrt{n!}} \\ \times \int u_{a_1''}^x(x_1'') u_{a_2''}^x(x_2'') \dots u_{a_n''}^x(x_n'') \left[\psi_N(x_1'' \dots x_n'') \right] dx_1'' dx_2'' \dots dx_n''$$

il termine intermedio integrale di $dx_1' \dots dx_n'$ è diverso da zero solo se

$$a_1'' = a_1' \dots a_i'' = a_i' \quad e \quad a_n'' = a_n'$$

Assumiamo, come già abbiamo detto, che siano le $u(x)$ autofunzioni dell'operatore d/dx : allora da quanto detto possiamo scrivere:

$$(15) \quad H_c' = \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{1}{\prod_{i < j} \left[1 - \frac{\text{tg} \left[-\frac{i}{\lambda} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \right]}{2} \right]} \left[\sum \frac{d^2}{dx_i^2} \right]$$

oppure anche

$$(16) \quad H_c' = \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{1}{\prod_{i < j} \left[1 - \exp \frac{1}{\lambda} \left(\frac{d}{dx_i} - \frac{d}{dx_j} \right) \right]^2} \left[\sum \frac{d^2}{dx_i^2} \right]$$

Per dimostrare le (15) e (16) basta verificare che l'espressione opera su una qualsiasi funzione d'onda $= u_{a_1}(x_1) u_{a_2}(x_2) \dots u_{a_n}(x_n)$ in modo perfettamente analogo alla (14)

Quando $a_1 < a_2 \dots < a_n$ con entrambi le definizioni (15) e (16) si ha infatti:

$$(17) \quad H'_c u_{a_1}(x_1) u_{a_2}(x_2) \dots u_{a_n}(x_n) = \sum (a_1^2 + \dots + a_n^2) u_{a_1}(x_1) u_{a_2}(x_2) \dots u_{a_n}(x_n)$$

Nel caso invece in cui non è $a_1 < a_2 \dots < a_n$ con la definizione (15) si ha

$$H'_c \psi = \infty \psi$$

Nessuna funzione per cui non è soddisfatto il principio di esclusione e cioè $a_1 < a_2 \dots < a_n$ non può quindi rappresentare una autofunzione corrispondente ad un'energia finita del sistema. Con la definizione (16) di H_c si ha $H'_c \psi = \infty \psi$ solo quando si ha un termine almeno in cui $a_i = a_j$ nell'espressione di ψ . Anche questa espressione porta al principio di esclusione. L'espressione (16) ha un significato fisico maggiore dell'espressione (15) la quale è conseguenza di una numerazione delle funzioni d'onda da noi stabilita arbitrariamente.

Ricaviamo ora l'espressione di H'_v :

$$(18) \quad H'_v = \sum_{\substack{a'_1 < a'_2 \dots < a'_n \\ a''_1 < a''_2 \dots < a''_n}} u_{a'_1}^x(x_1) u_{a'_2}^x(x_2) \dots u_{a'_n}^x(x_n) \int \left| \begin{array}{c} u_{a'_1} u_{a'_2} \dots u_{a'_n} \\ x'_1 x'_2 \dots x'_n \end{array} \right|_x \times \\ \times \left[\sum_{i,j=1}^n V(x'_i - x'_j) \right] \left| \begin{array}{c} u_{a''_1}^{x_n} u_{a''_2}^{x_n} \dots u_{a''_n}^{x_n} \\ x'_1 x'_2 \dots x'_n \end{array} \right|_{dx'_i} \times \\ \times \int \left| u_{a''_1}(x''_1) u_{a''_2}(x''_2) \dots u_{a''_n}(x''_n) \right| \psi dx''_i$$

ove dx''_i sta per $dx''_1 dx''_2 \dots dx''_n$ e dx'_i sta per $dx'_1 dx'_2 \dots dx'_n$. La (18) si può scrivere nella (19). Infatti si può verificare che gli operatori lineari (18) e (19) operano nello stesso modo su una qualsiasi funzione del tipo descritto della (5).

$$(19) \quad H'_v = \sum_c \left\{ \prod_c \left[\sum_p \pi_{c,p} (-1)^p \right] \right\} \left[\sum V(x_i - x_j) \right] \pi_1.$$

$$(19a) \quad \pi_c = e^{ia_1 x_1}, e^{ia_2 x_2}, \dots, e^{ia_n x_n}$$

cioè una combinazione di n numeri

$$(20) \quad a_1 < a_2 \dots < a_n$$

generici.

La \sum va intesa su tutte le combinazioni possibili di a_1, a_2, \dots, a_n sotto la condizione (20).

La π_{cp} ci fornisce la permutazione p ($a_{r1} \dots a_{rn}$) del set di numeri a_1, a_2, \dots, a_n nella espressione:

$$(21) \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \left[e^{-ia_1 x_1} e^{\frac{1}{\lambda} \left(\frac{d}{dx_1} - ia_1 \right)^2} e^{-ia_2 x_2} e^{\frac{1}{\lambda} \left(\frac{d}{dx_2} - ia_2 \right)^2} \dots \right. \\ \left. e^{-ia_{r3} x_3} e^{\frac{1}{\lambda} \left(\frac{d}{dx_3} - ia_3 \right)^2} \dots e^{-a_n x_n} e^{\frac{1}{\lambda} \left(\frac{d}{dx_n} - ia_n \right)^2} \right] = \pi_{cp}$$

π_1 = il moltiplicando di $\sum [d^2/dx_i^2]$ nella espressione (15) o (16).

Date queste definizioni possiamo scrivere "in questo nuovo sistema" l'equazione di Schroedinger:

$$(22) \quad (H'_c + H'_v) \psi = E_0 \psi \left[\sum \frac{d^2}{dx_i^2} + \sum_c \left\{ \prod_c \left[\sum_p \pi_{c,p} (-1)^p \right] \right\} \times \right. \\ \left. \times \left\{ \sum V(x_i - x_j) \right\} \pi_1 \right] \psi = E_0 \psi.$$

Necessariamente ψ non potrà che avere la forma seguente per la presenza di π_1 dato dalla (15)

8.

$$\psi = \sum_{a_{r1} < a_{r2} \dots < a_{rn}} P(a_{r1}, a_{r2}, \dots, a_{rn}) e^{ia_{r1}x_1} \dots e^{ia_{rn}x_n}$$

Chiameremo la (22) "equazioni d'onda di esclusione" per indicare che in questa equazione l'hamiltoniano porta come conseguenza il principio di esclusione.

CONSIDERAZIONI SULLE EQUAZIONI D'ONDA DI ESCLUSIONE. -

Come si vede il principio di esclusione potrebbe essere conseguenza del termine Π_1 cui si può attribuire un significato fisico: questo significato appare ancora più evidente se ricordiamo l'espressione (15) da cui risulta che i singoli termini di Π_1 sono funzioni del tipo

$$(23) \quad f = f_1 \left[\frac{1}{\lambda} \left(\frac{dx^2}{dx_i^2} - \frac{d^2}{dx_j^2} \right) \right] = f \left[\frac{1}{\lambda} (k_i^2 - 2k_i k_j + k_j^2) \right]$$

ove:

$k_1 = v_1$ velocità della particella i I_i corrente elettrica associata al moto della carica i -esima

$k_2 = v_2$ velocità della particella j I_j corrente elettrica associata al moto della carica j -esima

cioè dipenderà da k_i^2 , $k_i k_j$, e k_j^2 nello stesso modo come dipendono le energie magnetiche (proprie e mutue) associate a due correnti I_i ed I_j .

Quando scriviamo nelle varie espressioni precedenti $\lim_{\lambda \rightarrow 0}$ in realtà scriviamo la condizione:

$$(24) \quad \frac{\Delta K^2}{\lambda} \gg 1$$

ove ΔK è la dispersione in momento del set di particelle pari a

$$(25) \quad \Delta K = \sqrt{n} \frac{2\pi}{L}$$

ove n = numero di particelle, L = lunghezza della scatola che le contiene.

Riferendosi ad una scatola di lunghezza unitaria la condizione (24) risulta:

$$(26) \quad \frac{1}{\lambda} \gg \frac{1}{n}$$

cioè $1/\lambda$ deve essere molto minore della distanza media tra le particelle.

Viene il sospetto che non sia vero in termini assoluti la condizione $\lim_{\lambda \rightarrow 0}$ della equazione (15) ma che sia solo approssimato e che sia da sostituirsi $\lim_{\lambda \rightarrow \min}$ con λ_{\min} sufficientemente piccolo. L'equazione (22) si può scrivere ancora in modo più semplice:

$$(27) \lim_{\lambda \rightarrow \lambda_{\min}} \sum_c \left\{ \pi_c \left[\sum_p \pi_{cp} (-1)^p \right] \left[\sum_I \frac{d^2}{dx^2} + \left[\sum_{i,j} V(x_i - x_j) \right] \pi_1 \right] \right\} \psi = E \psi$$

Il termine π_1 si può interpretare come un correttivo del potenziale, correzione dovuta probabilmente ad interazioni magnetiche (per quanto detto precedentemente).

Consideriamo il moto di una particella di momento k_1 è assimilabile ad un'onda migrante (v. Fig. 1).

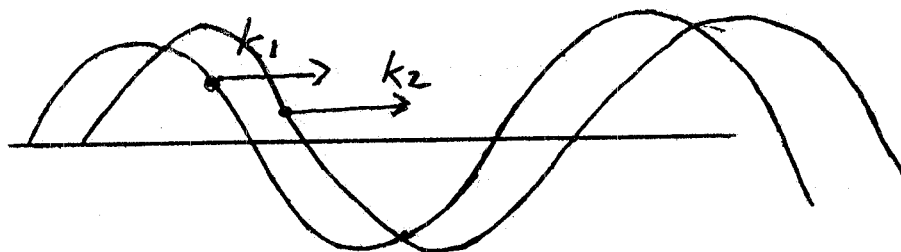


FIG. 1

Un campo analogo a quello elettromagnetico associato al moto di una seconda particella si somma in segno al campo associato alla prima dando luogo ad una interazione analoga a quelle delle correnti tra due fili paralleli percorsi da correnti alternate. Se i modi che descrivono le correnti sono a velocità o frequenze diverse o a fasi normali (spin opposto) l'energia mutua non viene influenzata; non appena diventano sincrone con fasi coincidenti ecco che nasce una energia mutua diversa da zero molto grande: questo è il significato dei fattori che intergono in π_1 (vedi formula (16)).

Il termine

$$\pi_c \left(\sum_{cp} (-1)^p \pi_{cp} \right)$$

oltre a eliminare l'ambiguità della rappresentazione ha pure un contenuto fisico che però non è di chiara interpretazione.

MODIFICA DELLA EQUAZIONE D'ONDA DI ESCLUSIONE IN CUI SI TIENE CONTO ANCHE DEGLI SPIN. -

In realtà l'equazione (27) non tiene conto degli spin, e cioè che la stessa funzione d'onda spaziale può rappresentare due particelle e non una sola, che cioè il principio di esclusione vale solo per metà delle particelle. Una interpretazione quale indicata nel paragrafo precedente può giustificare quanto accade: infatti se le due particelle hanno funzioni d'onda sfasate di 90° anche se sono sincrone l'energia mutua si annulla. In tale caso la hamiltoniana si può scrivere con:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \sum_{cp, cd} \pi_{cp} \pi_{cd} \left[\left(\sum_{pcd} \pi \right) \left(\sum_{pcp} \pi \right) \right] \left[\sum \frac{d^2}{dx^2} + \left(\sum V(x_i - x_j) \right) \pi_{1d} \pi_{1p} \right] \psi = E \psi$$

ove:

- π_{1d} = è data dalla (15) o (16) ove però le sommatorie sono limitate agli indici dispari
- π_{1p} = è data dalla (15) o (16) ove però le sommatorie sono limitate agli indici pari
- π_{cp} = $e^{ia_1 x_2} \dots e^{ia_{rn} x_{2n}}$ (x solo di indice pari)
- π_{cd} = $e^{ia_{r1} x_1} \dots e^{ia_{rn} x_{2n-1}}$ (x solo di indice dispari)
- π_{pcd} = data dalla (21) ove il prodotto è limitato a fattori con indici n dispari (per le x) (le a assumono tutti i valori possibili).
- π_{pcp} = data dalla (21) ove il prodotto è limitato a fattori con indici pari (per le x) (le a assumono tutti i valori possibili).

Si può convenzionalmente dire che le particelle di indice pari sono quelle di spin "up", quelle di indice dispari sono di spin "down".

CONCLUSIONI. -

Nel presente lavoro ho proposto un nuovo modo di scrivere l'equazione d'onda per un insieme di fermioni. Questa nuova equazione fa nascere il sospetto che il principio di esclusione non sia assoluto ma sia solo una descrizione limite del sistema di molti fermioni che cioè i vari tipi di particelle sono caratterizzate da un λ_{\min} determina l'hamiltoniana e cioè $H = \lim_{\lambda \rightarrow \lambda_{\min}} H(\lambda)$.

Inoltre fa nascere il sospetto che il principio di Pauli sia una conseguenza di interazioni tra particelle diverse da quelle del tipo elettrostatico ma di tipo delle forze di Lorentz. Mi riprometto nel prossimo futuro di indagare sul significato fisico di

$$\pi_c \left\{ \left[\sum_{cp} \pi (-1)^p \right] \left[\sum V(x_i - x_j) \right] \right\}$$