§Partículas idênticas e o Grupo de Permutações

Chamamos de "partículas idênticas" a partículas que possuem os mesmos parâmetros intrínsecos, como massa, carga, spin, etc. Em Mecânica Quântica não existe a possibilidade de distinguí-las, porque as trajetórias individuais não têm mais sentido (princípio de Incerteza). Para um sistema de n partículas idênticas, as permutações delas formam uma simetria fundamental, não existindo uma experiência que permita distinguir uma configuração de outra. Chamamos de S_n o grupo de permutações de n objetos. Este forma parte do grupo do Hamiltoniano de um sistema de n partículas idênticas.

Rotulamos (de maneira artificial) as partículas com os dígitos $j = 1, 2, \dots, n$. Representamos uma permutação por uma matriz (a representação não é única):

$$\sigma \in S_n \,, \quad \sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ \sigma(1) & \sigma(2) & \sigma(3) & \dots & \sigma(n) \end{pmatrix} ,$$

onde $\alpha_j = \sigma(j) \,, \quad j = 1, 2 \dots, n$ e

$\{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n\}$ é um arranjo dos dígitos $j = 1, 2, \dots, n$

Def: <u>Ciclo</u> : é uma permutação particular que envolve um subconjunto dos $\underline{n}$ dígitos, que transformam entre si de maneira fechada (e sem conter outro ciclo)

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & \alpha_1 & \dots & \alpha_j & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_j & \dots & \alpha_k & \dots & \alpha_n \end{pmatrix} = (1\alpha_1\alpha_j\alpha_k\dots)(2\alpha_2\dots)\dots\dots(\ )$$

Todos os ciclos comutam (envolvem dígitos diferentes)

<u>Teorema</u>. Toda permutação pode ser resolvida em ciclos. A estrutura de ciclos (exceto pela ordem) é única

<u>Exemplo</u>:
$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 5 & 6 & 1 & 2 \end{pmatrix} = (135)(246)$$

Def: <u>Multiplicação de permutações</u>

Sejam duas permutações $\sigma, \mu \in S_n$:

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}, \quad \mu = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_n \end{pmatrix}$$

Escrevemos μ na forma: $\mu = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \dots & \gamma_n \end{pmatrix}$.

Definimos agora o produto $\sigma\mu \in S_n$ como a permutação :

$$\sigma\mu = \begin{pmatrix} 1\,2 \dots & n \\ \cancel{\alpha_1\alpha_2 \dots} & \alpha_n \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \cancel{\alpha_1\alpha_2 \dots \alpha_n} \\ \gamma_1\,\gamma_2 \dots \gamma_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1\,2\,3 \dots & n \\ \gamma_1\gamma_2\gamma_3 \dots & \gamma_n \end{pmatrix}$$

- Em particular, a permutação idêntica e é representada por:

$$e = \begin{pmatrix} 1\,2\,3 \dots & n \\ 1\,2\,3 \dots & n \end{pmatrix}.$$

- Para $\sigma = \begin{pmatrix} 1\,2 \dots & n \\ \alpha_1\alpha_2 \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$, sua inversa σ^{-1} é

$$\sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha_1\alpha_2 \dots \alpha_n \\ 1\,2 \dots n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \sigma^{-1}(1) & \sigma^{-1}(2) & \dots & \sigma^{-1}(n) \end{pmatrix}$$

Def: Transposição τ_{ij}

Uma transposição τ é uma permutação que é apenas um ciclo de comprimento 2 (não escrevemos os ciclos de comprimento 1)

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} 1\,2 \dots i \dots j \dots n \\ 1\,2 \dots j \dots i \dots n \end{pmatrix} = (ij)$$

Teorema:

Toda permutação pode ser decomposta em um produto de transposições (em geral elas não comutam). Esta decomposição não é única. Porém a paridade do número de transposições sim é única e define a paridade da permutação (par ou ímpar). A permutação inversa σ^{-1} tem a mesma paridade que σ. A identidade e tem paridade positiva (par).

Def: Sinal de uma permutação

Seja $\sigma \in S_n$, definimos o sinal δ_σ de σ por

$$\delta_\sigma = \begin{cases} +1, & \text{se } \sigma \text{ for par,} \\ -1, & \text{se } \sigma \text{ for ímpar} \end{cases}$$

Uma transposição τ é sempre ímpar $\Rightarrow \delta_\tau = -1$.

— Seja uma permutação $\sigma \in S_n$, decomposta em produto de transposições:

$$\sigma = \prod_{k=1}^{n_\sigma} \tau_k$$

$$\Rightarrow \quad \delta_\sigma = (-1)^{n_\sigma}$$

— Produtos de uma permutação par por permutações ímpares são ímpares. Um produto de duas permutações ímpares é par. Em geral

$$\delta_{\sigma\mu} = \delta_\sigma \cdot \delta_\mu = \delta_{\mu\sigma}$$

– Conseqüência: $\delta_{\sigma\sigma^{-1}} = \delta_e = 1 = \delta_\sigma \cdot \delta_{\sigma^{-1}}$

$$\Longrightarrow \quad \delta_{\sigma^{-1}} = \delta_\sigma \, .$$

§ Simetrização de um estado quântico

Se tivermos um sistema de n partículas idênticas, toda troca de partículas (representada por uma permutação $\sigma \in S_n$) é uma simetria do sistema. Os valores esperados de qualquer observável físico do sistema e as amplitudes de probabilidade devem ser invariantes por uma permutação arbitrária das partículas.

Sejam $|\phi\rangle$ e $|\Psi\rangle$ dois kets-estados que descrevem o sistema. A base do espaço de configuração (que também envolve o spin das partículas) é escrita como:

$$|\vec{x}_1 s_1, \vec{x}_2 s_2, \ldots, \vec{x}_n s_n\rangle \equiv |\vec{x}_1 s_1\rangle\, |\vec{x}_2 s_2\rangle \cdots |\vec{x}_n s_n\rangle,$$

sendo um produto tensorial de kets de uma partícula.

Def: Função de onda

$$\Psi_{s_1 s_2 \ldots s_n}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_n) \equiv \langle \vec{x}_1 s_1, \vec{x}_2 s_2, \ldots, \vec{x}_n s_n \,|\, \Psi \rangle$$

Assumimos a completeza da base:

$$\sum_s \int d\vec{x}\, |\vec{x} s\rangle\langle \vec{x} s| = 1,$$

assim o produto escalar de dois estados pode ser escrito em termo das funções de onda:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{s_1,\dots,s_n} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \cdots \int d\vec{x}_n \, \langle \psi | \vec{x}_1 s_1, \dots, \vec{x}_n s_n \rangle \cdot$$

$$\cdot \langle \vec{x}_1 s_1, \vec{x}_2 s_2, \dots \vec{x}_n s_n | \phi \rangle$$

$$= \sum_{s_1 s_2 \dots} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \cdots \int d\vec{x}_n \, \psi^*_{s_1 s_2 \dots}(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_n) \, \phi_{s_1 s_2 \dots}(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_n)$$

Iremos (muitas vezes) abreviar a notação, escrevendo simplesmente:

$$\vec{x}_i s_i \longrightarrow \vec{x}_i$$

$$\sum_{s_1,\dots s_n} \int d\vec{x}_1 \cdots \int d\vec{x}_n \longrightarrow \int d\vec{x}_1 \cdots \int d\vec{x}_n ,$$

entendendo (se não for explicitado o contrário) que as somas sobre as variáveis de spin são sempre feitas.

Consideramos agora uma permutação $\sigma \in S_n$, que opera sobre o espaço de configuração:

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix} , \quad \sigma \vec{x}_i \equiv \vec{x}_{\alpha_i} , \quad i = 1, 2, \dots, n ,$$

ou escrevemos em forma abreviada $\sigma \vec{x} = \vec{x}_\alpha$.
Queremos transformar o estado físico por uma permutação. Como tratamos de uma simetria, representamos as permutações por <u>operadores unitários</u>:

$$\sigma \longleftrightarrow P_\sigma \ , \quad P_\sigma^\dagger \cdot P_\sigma = P_\sigma \cdot P_\sigma^\dagger = 1$$

<u>Def</u> : ket transformado

$$|\psi'\rangle \equiv P_\sigma |\psi\rangle \ , \text{ tal que}$$

$$\psi'(\vec{x}) = \psi(\sigma\vec{x})) .$$

Equivalentemente:

$$\langle \vec{x} | \psi' \rangle \equiv \langle \sigma(\vec{x}) | \psi \rangle = \langle \vec{x} | P_\sigma | \psi \rangle .$$

Em particular:

$$\langle \vec{x} | P_\sigma | \vec{x}' \rangle = \langle \sigma(\vec{x}) | \vec{x}' \rangle = \langle \vec{x}_{\alpha_1} | \vec{x}_1' \rangle \langle \vec{x}_{\alpha_2} | \vec{x}_2' \rangle$$

$$\ldots \langle \vec{x}_{\alpha_m} | \vec{x}_m' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x}_1' - \vec{x}_{\alpha_1}) \, \delta^{(3)}(\vec{x}_2' - \vec{x}_{\alpha_2}) \ldots \delta^{(3)}(\vec{x}_m' - \vec{x}_{\alpha_m})$$

Mostremos que os operadores P_σ são unitários. Sejam

$$|\psi'\rangle = P_\sigma |\psi\rangle \ , \qquad |\phi'\rangle = P_\sigma |\phi\rangle$$

$$\langle \psi' | \phi' \rangle = \int d\vec{x} \, \langle \psi' | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \phi' \rangle = \int d\vec{x} \, [\psi'(\vec{x})]^* \phi'(\vec{x})$$

$$= \int d\vec{x} \ \psi^*[\sigma(\vec{x})] \ \phi[\sigma(\vec{x})]$$

Mudança de variável: $\vec{x}' = \sigma(\vec{x})$

O Jacobiano da transformação é a unidade, pois apenas permutamos as coordenadas:

$$d\vec{x} = \left\| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}'} \right\| d\vec{x}' = d\vec{x}'$$

$$\langle \psi' | \phi' \rangle = \int d\vec{x}' \, \psi^*(\vec{x}') \, \phi(\vec{x}') = \langle \psi | \phi \rangle$$

$$= \left(\langle \psi | P_\sigma^\dagger \right) \left(P_\sigma | \phi \rangle \right) \implies P_\sigma^\dagger \cdot P_\sigma = 1$$

—o—

Seja agora um observável Ω do sistema de n partículas idênticas. A invariância sobre o grupo simétrico significa:

$$\langle \psi | \Omega | \phi \rangle = \langle \psi' | \Omega | \phi' \rangle = \langle \psi | P_\sigma^\dagger \Omega P_\sigma | \phi \rangle$$

e como os kets estados são arbitrários $\implies$

$$P_\sigma^\dagger \Omega P_\sigma = P_\sigma^{-1} \Omega P_\sigma = \Omega \, ,$$

ou equivalentemente,

$$[\Omega, P_\sigma] = 0, \text{ para toda } \sigma \in S_n .$$

De todas as simetrias possíveis, existem duas distintas, que definimos abaixo:

<u>Def</u>: <u>Estado totalmente simetrizado</u>, $|\psi_s\rangle$

Seja τ_{ij} uma transposição arbitrária. $|\psi_s\rangle$ satisfaz:

$$\langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_n | P_{\tau_{ij}} | \psi_s \rangle = \langle \vec{x}_1, \dots \vec{x}_j \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_n | \psi_s \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_j \dots \vec{x}_n | \psi_s \rangle, \quad (i<j)$$

ou equivalentemente

$$\psi_s(\tau_{ij}(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_n)) = \psi_s(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_j, \dots \vec{x}_i, \dots \vec{x}_n)$$

$$= \psi_s(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_j, \dots \vec{x}_n)$$

<u>Def</u>: <u>Estado totalmente anti-simetrizado</u>, $|\psi_A\rangle$

$$\langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_j \dots \vec{x}_n | (P_{\tau_{ij}} | \psi_A \rangle) = \langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_j \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_n | \psi_A \rangle =$$

$$= - \langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_j \dots \vec{x}_n | \psi_A \rangle, \quad (i<j)$$

ou equivalentemente:

$$\psi_A(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_j \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_n) = - \psi_A(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_i \dots \vec{x}_j \dots \vec{x}_n)$$

<u>Resultado</u>: para uma permutação arbitrária σ, temos:

i) $$\langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_n | P_\sigma | \psi_S \rangle = \langle \vec{x}_{\sigma(1)} \dots \vec{x}_{\sigma(n)} | \psi_S \rangle$$
$$= \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_n | \psi_S \rangle ;$$

ii) $$\langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_n | P_\sigma | \psi_A \rangle = \langle \vec{x}_{\sigma(1)} \dots \vec{x}_{\sigma(n)} | \psi_A \rangle$$
$$= \delta_\sigma \langle \vec{x}_1 \dots \vec{x}_n | \psi_A \rangle .$$

Conseqüências:

A) Estados de simetria diferente são ortogonais.

Seja τ uma transposição. Temos:

$$\langle \psi_S | \psi_A \rangle = \left(\langle \psi_S | P_\tau^\dagger \right) \left(P_\tau | \psi_A \rangle \right) = - \langle \psi_S | \psi_A \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \psi_S | \psi_A \rangle = 0 \ ;}$$

B) Seja Ω um observável do sistema (poderia ser o próprio Hamiltoniano do sistema de partículas idênticas). Sabemos que ele satisfaz:

$$P_\sigma^\dagger \cdot \Omega \cdot P_\sigma = \Omega$$

$$\langle \psi_S | \Omega | \psi_A \rangle = \langle \psi_S | P_\sigma^\dagger \Omega P_\sigma | \psi_A \rangle = \left(\langle \psi_S | P_\sigma^\dagger \right) \Omega \left(P_\sigma | \psi_A \rangle \right)$$

$$= - \langle \psi_S | \Omega | \psi_A \rangle \implies \boxed{\langle \psi_S | \Omega | \psi_A \rangle = 0 .}$$

§ Operadores de projeção sobre as variedades simétricas e anti-simétricas

Dado um estado arbitrário (de n-partículas), sempre podemos construir estados simétricos e anti-simétricos, projetando sobre as respectivas variedades.

Def. Simetrizador e anti-simetrizador.

São definidos como:

$$S \equiv \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} P_\sigma \quad ,$$

$$A \equiv \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} \delta_\sigma P_\sigma \quad .$$

De maneira genérica, escrevemos os operadores como

$$\Lambda = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} \lambda_\sigma P_\sigma \, ,$$

com
$$\lambda_\sigma = \begin{cases} +1, & \text{para } S; \\ \delta_\sigma, & \text{para } A. \end{cases}$$

Estes operadores têm as seguintes propriedades (exercício):

i) Λ é hermitiano, $\Lambda^\dagger = \Lambda$;

ii) $\Lambda P_\sigma = P_\sigma \Lambda$, para toda permutação $\sigma \in S_n$

iii) $\Lambda^2 = \Lambda$, $AS = SA = 0$, operadores de projeção.

§ **Exemplo:** Caso de 2 (duas) partículas

Assumamos que o número $\{k'\}$ representa um conjunto de números quânticos para estados de 1-partícula. Escrevemos como $|k'\rangle$ o correspondente ket, autoestado de um certo conjunto de observáveis. Seja $|k''\rangle$ o ket correspondente da outra partícula. O ket para o sistema de duas partículas pode ser escrito como o produto

$$|k'\rangle |k''\rangle = |k'\rangle \otimes |k''\rangle ,$$

onde é entendido que o primeiro se refere à partícula 1 e o segundo à partícula 2. Podemos considerar também o estado

$$|k''\rangle |k'\rangle ,$$

onde a partícula 1 está no estado caraterizado por $\{k''\}$ e 2 em $\{k'\}$. Para $k' \neq k''$ os dois estados são ortogonais:

$$\left(\langle k''| \langle k'|\right)\left(|k''\rangle |k'\rangle\right) = \langle k''|k'\rangle \langle k'|k''\rangle$$

$$= \left|\langle k'|k''\rangle\right|^2 = 0 \,, \quad \text{para } k' \neq k'' .$$

Assumamos que fazemos uma medida sobre o sistema de duas partículas. Como resultado, obtemos k' para uma partícula e k'' para a outra. Como as partículas são idênticas, não sabemos a priori se o ket era $|k'\rangle|k''\rangle$ ou $|k''\rangle|k'\rangle$, ou qualquer combinação linear destes dois kets. Quer dizer que todos os kets da forma

$$c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle$$

dão idênticos conjuntos de autovalores quando feita a medida. Isto é chamado <u>degenerescência de troca</u> (exchange).

O grupo de permutações de duas partículas só tem 2 elementos : e, (12).

Chamamos P_{12} o operador de permutação

$$P_{12}|k'\rangle|k''\rangle \equiv |k''\rangle|k'\rangle$$

com $P_{12} = P_{21}$, $P_{12}^2 = 1$.

Consideremos apenas um observável específico A para cada partícula. Usamos a notação:

$$A_1|a'\rangle|a''\rangle = a'|a'\rangle|a''\rangle$$

$$A_2|a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle$$

ou $A_1 = A_1 \otimes 1_2$, $A_2 = 1_1 \otimes A_2$

Aplicando o operador de permutação sobre a primeira, temos:

$$P_{12} A_1 |a'\rangle|a''\rangle = a' P_{12} |a'\rangle|a''\rangle$$

$$= a' |a''\rangle|a'\rangle = P_{12} A_1 P_{12}^{-1} \cdot P_{12} |a'\rangle|a''\rangle$$

$$= (P_{12} A_1 P_{12}^{-1}) |a''\rangle|a'\rangle = A_2 |a''\rangle|a'\rangle,$$

de maneira que obtemos consistência quando

$$P_{12} A_1 P_{12}^{-1} = A_2 ,$$

isto é a permutação P_{12} troca o índice dos observáveis. Consideremos agora o Hamiltoniano de um par de partículas idênticas:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m} + V_{int}(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) + V_{ext}(\vec{x}_1) + V_{ext}(\vec{x}_2).$$

Claramente vemos que o Hamiltoniano é invariante pela permutação das partículas:

$$P_{12} \mathcal{H} P_{12}^{-1} = \mathcal{H} \Rightarrow [P_{12}, \mathcal{H}] = 0$$

Neste caso P_{12} "é conservado", pode ser diagonalizado simultaneamente com o Hamiltoniano. Seja p' um autovalor de P_{12}. $P_{12}^2 = 1 \Rightarrow p'^2 = 1$

com os valores possíveis, $p = \pm 1$. Temos duas combinações lineares com autovalor p' bem definido:

$$|k'k''\rangle_{(+)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|k'\rangle |k''\rangle + |k''\rangle |k'\rangle \right),$$

$$|k'k''\rangle_{(-)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|k'\rangle |k''\rangle - |k'\rangle |k''\rangle \right),$$

com

$$P_{12}\, |k'k''\rangle_{(+)} = + \, |k'k''\rangle_{(+)} ,$$

$$P_{12}\, |k'k''\rangle_{(-)} = - \, |k'k''\rangle_{(-)} ,$$

Que correspondem à ação do Simetrizador e o Anti-simetrizador

$$S \equiv \frac{1}{2}(1 + P_{12}) \quad , \quad A \equiv \frac{1}{2}(1 - P_{12}),$$

com

$$\left.\begin{matrix} S \\ A \end{matrix}\right\} \left[c_1 |k'\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k'\rangle \right] =$$

$$= \frac{c_1 \pm c_2}{2} \left(|k'\rangle |k''\rangle \pm |k''\rangle |k'\rangle \right)$$

Já mostramos que esta noção pode ser estendida para um sistema de um número arbitrário de partículas:

$$P_{ij}\left(|k'\rangle|k''\rangle\cdots|k^i\rangle\cdots|k^j\rangle\cdots|k^{(n)}\rangle\right)$$

$$= |k'\rangle|k''\rangle\cdots|k^j\rangle\cdots|k^i\rangle\cdots|k^{(n)}\rangle$$

com $P_{ij}^2 = 1$, e com autovalores ± 1. Porém, é importante notar que em geral

$$[P_{ij}, P_{kl}] \neq 0,$$

quando dois índices coincidem. P_{ij} é na verdade a transformação unitária induzida por uma permutação no espaço de configuração. Para distinguir, chamamos σ_{ij} a permutação em correspondência com P_{ij}, isto é:

$$\langle \sigma_{ij}(\vec{x}_1\vec{x}_2\cdots\vec{x}_n)|\psi\rangle = \langle \vec{x}_1,\vec{x}_2,\ldots,\vec{x}_n|P_{ij}|\psi\rangle$$

Se o ket $|\psi\rangle$ é um produto do tipo:

$$|\psi\rangle = |k_1\rangle|k_2\rangle\cdots|k_n\rangle$$

temos, com $i<j$:

$$\langle \sigma_{ij}(\vec{x}_1\cdots\vec{x}_i\cdots\vec{x}_j\cdots\vec{x}_n)|\psi\rangle = \langle \vec{x}_1,\vec{x}_2\cdots\vec{x}_j\cdots\vec{x}_i\cdots\vec{x}_n|\psi\rangle$$

$$= \langle \vec{x}_1\cdots\vec{x}_n|P_{ij}|\psi\rangle = \langle \vec{x}_1|\langle\vec{x}_2|\cdots\langle\vec{x}_j|\cdots\langle\vec{x}_i|\cdots\langle\vec{x}_n|\psi\rangle$$

$$= \left(\langle \vec{x}_1 | \langle \vec{x}_2 | \ldots \langle \vec{x}_j | \ldots \langle \vec{x}_i | \ldots \langle \vec{x}_n | \right) \left(|k_1\rangle |k_2\rangle \ldots |k_i\rangle \cdots |k_j\rangle \ldots |k_n\rangle \right)$$

$$= \langle \vec{x}_1 | k_1 \rangle \langle \vec{x}_2 | k_2 \rangle \cdots \langle \vec{x}_j | k_i \rangle \cdots \langle \vec{x}_i | k_j \rangle \cdots \langle \vec{x}_n | k_n \rangle$$

que pode ser rearranjado para:

$$= \langle \vec{x}_1 | k_1 \rangle \langle \vec{x}_2 | k_2 \rangle \cdots \langle \vec{x}_i | k_j \rangle \cdots \langle \vec{x}_j | k_i \rangle \cdots \langle \vec{x}_n | k_n \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots \vec{x}_i, \ldots \vec{x}_j, \ldots \vec{x}_n | k_1, k_2, \ldots, k_j \ldots k_i \ldots k_n \rangle,$$

de maneira que temos

$$P_{ij} |k_1\rangle |k_2\rangle \ldots |k_i\rangle \cdots |k_j\rangle \ldots |k_n\rangle =$$

$$= |k_1\rangle |k_2\rangle \ldots |k_j\rangle \cdots |k_i\rangle \cdots |k_n\rangle$$

Para uma permutação arbitrária temos:

$$\langle \sigma \vec{x} | \Psi \rangle = \langle \vec{x} | P | \Psi \rangle = \langle \vec{x}_{\sigma(1)}, \vec{x}_{\sigma(2)}, \ldots \vec{x}_{\sigma(n)} | \Psi \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_{\sigma(1)} \vec{x}_{\sigma(2)} \cdots \vec{x}_{\sigma(n)} | k_1 k_2 \ldots k_n \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_{\sigma(1)} | k_1 \rangle \langle \vec{x}_{\sigma(2)} | k_2 \rangle \cdots \langle \vec{x}_{\sigma(n)} | k_n \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_1 | k_{\sigma^{-1}(1)} \rangle \langle \vec{x}_2 | k_{\sigma^{-1}(2)} \rangle \cdots \langle \vec{x}_n | k_{\sigma^{-1}(n)} \rangle$$

$$= \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \ldots \vec{x}_n | P_\sigma | \Psi \rangle$$

com

$$P_\sigma |k_1\rangle|k_2\rangle \cdots |k_n\rangle = |k_{\sigma^{-1}(1)}\rangle |k_{\sigma^{-1}(2)}\rangle \cdots |k_{\sigma^{-1}(n)}\rangle,$$

operando com a permutação inversa no espaço dos kets estado.

▶ POSTULADO de SIMETRIZAÇÃO

O exemplo de duas partículas pode ser "misleading". Além das simetrias A e S existem simetrias mistas, nem totalmente simétricas nem totalmente anti-simétricas. Isto já pode ser observado com 3 partículas. Consideramos kets do tipo

$$|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle ,$$

Os estados A e S são:

$$|k'k''k'''\rangle_{A,S} = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big(|k',k'',k'''\rangle + |k''k'''k'\rangle + |k'''k'k''\rangle$$
$$\pm |k'k'''k''\rangle \pm |k'''k''k'\rangle \pm |k''k'k'''\rangle\Big),$$

mas a degenerescência de troca implica em degenerescência 6. De maneira que temos mais 4 estados que não são nem simétricos nem anti-simétricos, e linearmente independentes. Por exemplo, o estado

$$|1\rangle = \frac{1}{2}\Big(|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle|k'''\rangle -$$
$$- |k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle - |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle\Big)$$

operando com as transposições elementares geramos uma base

$$P_{12}|1\rangle = \frac{1}{2}\Big(|k''\rangle|k'\rangle|k'''\rangle + |k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle - |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle - |k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle\Big)$$

$$= |1\rangle,$$

portanto o estado é simétrico em relação à permutação (12).
Vejamos as outras:

$$P_{23}|1\rangle = \frac{1}{2}\Big(|k'\rangle|k'''\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle - |k'''\rangle|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle|k'''\rangle\Big)$$

$$\equiv |2\rangle$$

Esta última é um estado linearmente independente, portanto aqui não existe nenhuma simetria definida.
Finalmente, para a última transposição, temos:

$$P_{13}|1\rangle = \frac{1}{2}\Big(|k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle + |k'''\rangle|k'\rangle|k''\rangle - |k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle - |k'\rangle|k'''\rangle|k''\rangle\Big)$$

$$= -\big(|1\rangle + |2\rangle\big),$$

uma combinação linear. Vemos assim que o subespaço $(|1\rangle, |2\rangle)$ é fechado por permutações. Faltam ainda duas funções para preencher o espaço completo.

▸ Exercício. Mostre que as duas funções que faltam podem ser geradas a partir de

$$|3\rangle = \frac{1}{2}\Big(|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle|k'''\rangle + |k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle - |k'''\rangle|k'\rangle|k''\rangle\Big)$$

e assim completamos o espaço de degenerescência de troca. O ket $|3\rangle$ é simétrico em relação a (13).

Escrevendo os kets anteriores assumimos que $k' \neq k'' \neq k'''$. Se dois índices coincidem não podemos anti-simetrizar em relação a estes estados.

Na natureza só existem dois tipos de simetria para um sistema de N partículas idênticas:

A) Bósons, que satisfazem a estatística de Bose-Einstein, com ket "completamente" simétrico:

$$P_{ij}\,|N\text{-bósons}\rangle = +\,|N\text{-bósons}\rangle\ ;$$

B) Férmions, que satisfazem a estatística de Fermi-Dirac, com ket "completamente" anti-simétrico

$$P_{ij}\,|N\text{-férmions}\rangle = -\,|N\text{-férmions}\rangle\ ;$$

para qualquer permutação P_{ij} de duas partículas (transposição).

Existe também uma ligação entre o spin da partícula e a sua estatística:

i) partículas com spin semi-inteiro são férmions;
ii) partículas com spin inteiro são bósons.

Princípio de Exclusão de Pauli

Para um sistema de férmions, duas partículas não podem ocupar o mesmo estado quântico. ~~Isto~~ porque o ket do sistema é completamente anti-simétrico

Exemplo. Consideremos um sistema de partículas com $N=2$ com apenas dois estados (k', k''), $k' \neq k''$.

a) Férmions: temos apenas uma possibilidade,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle\right)$$

que é o ket completamente antisimétrico;

b) Bósons: temos três possibilidades de ket completamente simétricos

$$|k'\rangle|k'\rangle, \quad |k''\rangle|k''\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle\right)$$