

# 4 - PARTÍCULAS IDÊNTICAS

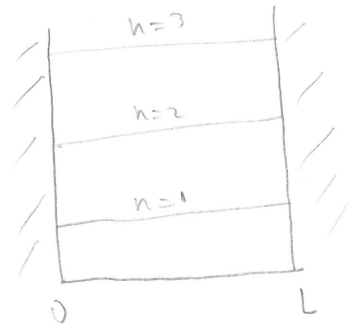
Quando duas partículas são idênticas em suas características, como dois elétrons, não é possível distinguir uma da outra a todo instante. Não podemos falar do elétron número 1 em  $r_1$  e do elétron número 2 em  $r_2$ , MAS APENAS de 2 elétrons, estando um deles em  $r_1$  e o outro em  $r_2$ . A consequência desse fato é que a função de onda  $\Psi(r_1, r_2)$  tem certas propriedades de simetria em relação à troca dos índices 1 e 2.

Para fixar ideias, considere duas partículas idênticas sem spin em um poço de potencial infinito de tamanho  $L$ . Vamos supor que as partículas não interagem em si. O problema de uma única partícula num caixa unidimensional é

$$H = \frac{P^2}{2m}$$

$$\langle x | n, \rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$



O sistema com duas partículas é dado por

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m}$$

que é a soma das energias cinéticas de cada partícula. Seja  $P_{12}$  o operador que troca a partícula 1 pela 2. Vamos ver que

$$[H, P_{12}] = 0$$

e que  $P_{12}^2 = 1$ . Note que a condição  $[H, P_{12}] = 0$  deve se manter mesmo que hajam interações entre as partículas. Devem haver funções de onda simultâneas de  $H$  e  $P_{12}$ , que devem ser da forma

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1, n_2}^{\pm}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \langle x_1, x_2 | n_1, n_2 \rangle \pm \langle x_1, x_2 | n_2, n_1 \rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{2}{L} \left[ \sin \frac{n_1 \pi x_1}{L} \sin \frac{n_2 \pi x_2}{L} \pm \sin \frac{n_2 \pi x_1}{L} \sin \frac{n_1 \pi x_2}{L} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x_1, x_2 | (1 \pm P_{12}) | n_1, n_2 \rangle \end{aligned}$$

ou  $|\Psi_{n_1, n_2}^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \pm P_{12}) |n_1, n_2\rangle$

com  $P|\Psi^{\pm}\rangle = \pm |\Psi^{\pm}\rangle$ .

Verifica-se na natureza que essas funções são de fato as únicas possíveis, correspondendo a bósons e férmions. Nesse capítulo vamos tratar o problema de  $N$  partículas idênticas evitando o uso dos operadores de simetria e usando os chamados estados de Fock. Esse tratamento fará conexão direta com a teoria de campos e a chamada segunda quantização.

Exercício: construa estados simétricos e antissimétricos para duas partículas com spin  $1/2$  no poço infinito de potencial. Escreva os estados de partículas únicas como  $|n\sigma\rangle$  onde  $n=1, 2, \dots$  e  $\sigma = \pm$ .

## 4.1 - O espaço de estados

A construção do espaço de estados para um sistema de  $n$  partículas idênticas é baseada em algumas hipóteses básicas. Assumimos que o estado de uma única partícula possa ser especificado por um conjunto completo de observáveis que comutam, chamado de  $K$ , com autovalores  $K_i$ . No caso de uma partícula em uma caixa 3-D

$$K = \{ \hat{p}_x / \hbar m, \hat{p}_y / \hbar m, \hat{p}_z / \hbar m \} \quad \text{e} \quad K_i = \left\{ \frac{\hbar^2 k_x^2}{2mL^2}, \frac{\hbar^2 k_y^2}{2mL^2}, \frac{\hbar^2 k_z^2}{2mL^2} \right\}.$$

Hipótese: qualquer conjunto completo de operadores que descreve o comportamento de uma única partícula também pode ser usado para descrever  $n$  partículas do mesmo tipo

Note que o conceito de partícula pode mudar de acordo com a situação física. Um próton é uma partícula se os processos envolvidos não forem de energias muito altas. Nesse caso teríamos que falar de quarks com partículas e o próton seria um estado composto. Da mesma forma um átomo ou mesmo uma molécula podem ser considerados como partículas em algumas situações.

Em seguida postulamos que para cada autovalor  $K_i$  existe um operador "número de ocupação"  $N_i$  cujos autovalores caracterizam estado do sistema onde existem  $n_i$  partículas com autovalor  $K_i$ . Os autovalores  $n_i$  de  $N_i$  são números de ocupação. Assumimos que o conjunto de todos os  $N_i$  formam um conjunto completo de operadores. Esse postulado fundamental terá consequências importantes sobre a existência de estados simétricos ou anti-simétricos APENAS.

o postulado fundamental implica que os estados

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$

no qual  $n_i$  partículas tem o valor  $k_i$ ,  $n_2$  tem o valor  $k_2$ , etc., formam uma base no espaço de estados, conhecido como ESPAÇO DE FOCK.

Exemplos:

$$\psi^{(0)} \equiv |0\rangle = |000\dots\rangle = \text{estado sem partículas} = \text{v\u00e1cuo}$$

$$\psi_i^{(1)} = |00\dots 0, n_i=1, 00\dots\rangle = 1 \text{ part\u00edcula com } k_i$$

Nesse formalismo a indistinguibilidade est\u00e1 impl\u00edcita. Nunca dizemos qual part\u00edcula est\u00e1 em qual estado. O estado

$$\psi_{12}^{(2)} = |11000\dots\rangle$$

denota uma part\u00edcula com  $k_1$  e outra com  $k_2$ .

No que segue vamos simbolizar estado de part\u00edcula \u00fanica por  $|k_i\rangle$ , e estado de Fock por  $|n_1, n_2, \dots\rangle$ . Veja

$$\text{que } |k_i\rangle = |00\dots n_i=1 0\dots 00\rangle.$$

## 4.2 - Operadores de Criação e Aniquilação

(89)

Definimos o operador  $a_i^\dagger$  de tal forma que

$$a_i^\dagger |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle \propto |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i+1, n_{i+1}, \dots\rangle.$$

O operador de criação  $a_i^\dagger$  adiciona uma partícula com autovalores  $k_i$ . Se  $a_i$  é o conjugado hermitiano de  $a_i^\dagger$ , então

$$a_i |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle \propto |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i-1, n_{i+1}, \dots\rangle$$

e faz o papel de operador de aniquilação.

PROVA: Vamos abreviar a notação mostrando apenas  $|n_i\rangle$ .

ENTÃO  $a_i^\dagger |n_i\rangle \propto |n_i+1\rangle$

$$\langle n_i+1 | a_i^\dagger |n_i\rangle = c$$

$$\langle n_i | a_i |n_i+1\rangle = c^*$$

$$a_i |n_i+1\rangle \propto |n_i\rangle \text{ ou } a_i |n_i\rangle \propto |n_i-1\rangle.$$

Para determinar a constante de proporcionalidade de

imponhamos que

$$a_i^\dagger \Psi_i^{(0)} = a_i^\dagger |0\rangle = \Psi_i^{(1)} = |k_i\rangle = |0, \dots, n_i=1, 0, \dots\rangle$$

$$a_i \Psi_j^{(1)} = a_i |k_j\rangle = a_i |0, \dots, n_j=1, 0, \dots\rangle = \delta_{ij} |0\rangle$$

$$a_i |0\rangle = a_i |\Psi_i^{(1)}\rangle = 0$$

Veremos adiante como ficam as constantes para o caso de ação em estados com mais de uma partícula.

Uma propriedade importante que segue dessa escolha é que se  $\psi^{(n)}$  é um estado arbitrário de uma partícula, então

$$|\langle 0 | a_i | \psi^{(n)} \rangle|^2 = |\langle \kappa_i | \psi^{(n)} \rangle|^2 = \langle \psi^{(n)} | a_i^\dagger a_i | \psi^{(n)} \rangle$$

i.e., a probabilidade de encontrar a partícula com  $\kappa_i$  é o valor esperado de  $a_i^\dagger a_i$  nesse estado. Veremos adiante que  $a_i^\dagger a_i = N_i$ .

PROVA

Escrevendo

$$|\psi^{(n)}\rangle = \sum_j c_j |\psi_j^{(n)}\rangle = \sum_j c_j a_j^\dagger |0\rangle,$$

$$\langle 0 | a_i | \psi^{(n)} \rangle = \sum_j \langle 0 | a_i a_j^\dagger | 0 \rangle c_j = \sum_j c_j \underbrace{\langle \psi_i^{(n)} | \psi_j^{(n)} \rangle}_{\delta_{ij}} = c_i$$

$$|\langle 0 | a_i | \psi^{(n)} \rangle|^2 = |c_i|^2$$

Por outro lado  $a_i |\psi^{(n)}\rangle = \sum_j c_j \underbrace{a_i |\psi_j^{(n)}\rangle}_{\delta_{ij} |0\rangle} = c_i |0\rangle$

$$\text{e } \langle \psi^{(n)} | e_i^\dagger a_i | \psi^{(n)} \rangle = |c_i|^2$$

Suponha agora que um outro conjunto de operadores  $L$  seja usado para descrever o problema de uma única partícula, de forma que  $|L_i\rangle$  também forme uma base. Então

$$|\kappa_i\rangle = \sum_q |L_q\rangle \langle L_q | \kappa_i \rangle$$

onde  $U_{qi} = \langle L_q | \kappa_i \rangle$  é uma matriz unitária. Seja  $\Phi$  o estado de Fock nessa representação. Então

$$\Phi^{(0)} = \psi^{(0)} = |0\rangle = \text{estado sem partículas}$$

$$\Phi_i^{(1)} = |0, 0, \dots, \tilde{n}_i=1, 0, \dots\rangle =$$

uma partícula com autovalores  $L_i$ .

Introduzimos operadores de criação e aniquilação

$b_i^+$  e  $b_i$  nessa nova base da mesma maneira que fizemos com  $a_i^+$  e  $a_i$ . Para estado de uma partícula sabemos que

$$a_i^+ |0\rangle = \Psi_i^{(1)} = |K_i\rangle = \sum_q |L_q\rangle \langle L_q | K_i \rangle = \sum_q b_q^+ \langle L_q | K_i \rangle |0\rangle$$

o que leva a

$$\begin{aligned}
 a_i^+ &= \sum_q b_q^+ \langle L_q | K_i \rangle \\
 a_i &= \sum_q b_q \langle K_i | L_q \rangle
 \end{aligned}$$

A segunda relação é trivial se aplicada em  $|0\rangle$ , mas vale também se aplicada em estado de uma partícula:

$$\begin{aligned}
 a_i \Psi_j^{(1)} &= \delta_{ij} \Psi_j^{(1)} = \sum_q \langle K_i | L_q \rangle \langle L_q | K_j \rangle \Psi_j^{(1)} \\
 &= \sum_{q,r} \langle K_i | L_q \rangle \langle L_r | K_j \rangle \underbrace{\delta_{rq} \Psi_j^{(1)}}_{b_q \phi_r^{(1)}} \\
 &= \sum_q b_q \langle K_i | L_q \rangle \underbrace{\sum_r \phi_r^{(1)} \langle L_r | K_j \rangle}_{\sum_r |L_r\rangle \langle L_r | K_j \rangle = |K_j\rangle = \Psi_j^{(1)}} \\
 &= \sum_q b_q \langle K_i | L_q \rangle \Psi_j^{(1)} \Rightarrow a_i = \sum_q b_q \langle K_i | L_q \rangle.
 \end{aligned}$$

Vamos assumir que a relação de transformação entre bases, que é dada pelo operador de uma partícula, seja geral e possa ser aplicada em qualquer estado de  $n$  partículas.

Um exemplo importante é o de um elétron no potencial externo de  $Z$  prótons. Esquecendo por enquanto da parte contínua do espectro, os auto-estados de  $H$  são caracterizados pelos auto-valores dos operadores

$$K = \{ H, L^2, S^2, L_z, S_z \}$$

com números quânticos

$$K_i = \{ E_{nl}, \hbar^2 l(l+1), \frac{3}{4}\hbar^2, m_l \hbar, m_s \hbar \}.$$

Podemos descrever esse conjunto de estados de 1 partícula usando também a nova base de auto-estados comuns do conjunto

$$L = \{ H, L^2, S^2, J^2, J_z \} \quad \text{onde} \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

com

$$L_i = \{ E_{nl}, \hbar^2 l(l+1), \frac{3}{4}\hbar^2, \hbar^2 j(j+1), \hbar m_j \} ; j = l \pm 1/2$$

Nesse caso a mudança de base é dada por

$$|l+1/2, m_j\rangle = \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}} |m_j-1/2, +\rangle + \sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}} |m_j+1/2, -\rangle$$

$$|l-1/2, m_j\rangle = -\sqrt{\frac{l-m_j+1/2}{2l+1}} |m_j-1/2, +\rangle + \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}} |m_j+1/2, -\rangle$$



# 4.3 - A ALGEBRA dos operadores $a_i^\dagger$ e $a_i$

PARA deduzir as relações de comutação entre os operadores de criação e ANIQUILAÇÃO adotamos o "princípio da simetria unitária", que impõe que a teoria A ser desenvolvida tem a mesma forma quaisquer que sejam os operadores de uma partícula escolhido:  $K, a_i^\dagger, a_i$  em  $L, b_i^\dagger, b_i$  onde  $|K_i\rangle$  e  $|L_i\rangle$  estão ligados por uma transformação unitária.

Começamos com

$$a_i^\dagger a_j^\dagger \Psi = \lambda a_j^\dagger a_i^\dagger \Psi$$

pois, independente da ordem de criação das duas partículas, o estado físico final deve ser o mesmo. Queremos que  $\lambda$  NÃO dependa da representação.

Assim

$$0 = (a_i^\dagger a_j^\dagger - \lambda a_j^\dagger a_i^\dagger) \Psi = \sum_{k,l} \langle L_k | K_i \rangle \langle L_l | K_j \rangle (b_k^\dagger b_l^\dagger - \lambda b_l^\dagger b_k^\dagger) \Psi$$

De fato, embora  $\sum_k \langle K_i | L_k \rangle \langle L_k | K_j \rangle = \delta_{ij}$

A relação acima é sem geral. Uma solução possível é impon

$$b_k^\dagger b_l^\dagger - \lambda b_l^\dagger b_k^\dagger = 0 \quad \forall \text{ todos } k \text{ e } l$$

Nesse caso vale também

$$b_l^\dagger b_k^\dagger - \lambda b_k^\dagger b_l^\dagger = 0, \text{ pois } k, l \text{ são índices mudos.}$$

e assim  $\lambda^2 = 1$  ou

$$\boxed{\lambda = \pm 1}$$

Essa solução é importante porque mostra que  $\lambda$  NÃO depende de  $i, j$ ,

$\Psi$  ou da representação:  $a_i^\dagger a_j^\dagger = \pm a_j^\dagger a_i^\dagger$  é uma propriedade da partícula... da simetria unitária.

Assim, existem apenas duas classes de operadores:

os que satisfazem relações de comutação

$$a_i^+ a_j^+ - a_j^+ a_i^+ = 0$$

e os que satisfazem relações de anti-comutação

$$a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i^+ = 0$$

Tomando o conjugado hermitiano obtemos, respectivamente

$$a_i a_j - a_j a_i = 0$$

ou

$$a_i a_j + a_j a_i = 0$$

Agora olhamos o caso misto:

$$a_i a_j^+ \Psi = \mu a_j^+ a_i \Psi \quad i \neq j,$$

que leva à

$$0 = (a_i a_j^+ - \mu a_j^+ a_i) \Psi = \sum_{k, l} \langle k_i | L_k \rangle \langle L_l | k_j \rangle (b_k b_l^+ - \mu b_l^+ b_k) \Psi$$

Pelo princípio de simetria unitária impomos que vale

$$b_k b_l^+ - \mu b_l^+ b_k = 0 \quad \text{p/ } k \neq l.$$

Os termos  $k=l$  que sobram ficam

$$0 = \sum_k \langle k_i | L_k \rangle \langle L_k | k_j \rangle (b_k b_k^+ - \mu b_k^+ b_k)$$

que tem solução se

$$b_k b_k^+ - \mu b_k^+ b_k = A = \text{operador independente do índice } k$$

De fato isso leva à

$$A \sum_k \langle k_i | L_k \rangle \langle L_k | k_j \rangle = A \langle k_i | k_j \rangle = 0$$

pois  $i \neq j$ . Além disso vemos que

$$\begin{aligned} a_i a_i^\dagger - \mu a_i^\dagger a_i &= \sum_{k,l} \langle k_i | L_k \rangle \langle L_l | k_i \rangle \underbrace{(b_k b_l^\dagger - \mu b_l^\dagger b_k)}_{A \delta_{kl}} \\ &= \sum_k \langle k_i | L_k \rangle \langle L_k | k_i \rangle A \\ &= A \end{aligned}$$

Isso mostra que o operador  $A$  é o mesmo para toda representação, e deve ser muito especial. Aplicando no vácuo vemos que

$$A |0\rangle = \underbrace{a_i a_i^\dagger |0\rangle}_{\psi_i^{(1)}} + \underbrace{\mu a_i^\dagger a_i |0\rangle}_0 = a_i \psi_i^{(1)} = |0\rangle$$

o que mostra que podemos escolher  $A = \text{Identidade}$  e

$$a_i a_i^\dagger - \mu a_i^\dagger a_i = 1$$

A constante  $\mu$  ainda precisa ser determinada. Para isso notamos que o operador

$$N = \sum_i N_i$$

cujos autovalores dão o número total de partículas no sistema, deve ser invariante por representação, i.e.,

$$N = \sum_i N_i = \sum_k \tilde{N}_k$$

Além da identidade vemos que

$$\begin{aligned}\sum_i a_i^\dagger a_i &= \sum_{i,k,l} b_k^\dagger b_l \langle L_k | K_i \rangle \langle K_i | L_l \rangle \\ &= \sum_{k,l} b_k^\dagger b_l \langle L_k | L_l \rangle = \sum_k b_k^\dagger b_k\end{aligned}$$

é INVARIANTE, Assim como  $\sum_i a_i a_i^\dagger = \sum_k b_k b_k^\dagger$ . Esses últimos, no entanto podem ser escritos em termos dos primeiros e da identidade.

Assim, supomos que

$$N_i = \alpha a_i^\dagger a_i + \gamma I, \quad \alpha, \gamma \text{ constantes,}$$

Como  $N_i |0\rangle = 0$ ,  $\gamma = 0$ . Como  $N_i \psi_i^{(n)} = n \psi_i^{(n)}$ ,  $n=1$

e Assim

$$\boxed{N_i = a_i^\dagger a_i}$$

Assim, para  $i \neq k$ ,

$$N_i a_k |n_1 \dots n_k \dots\rangle = c N_i |n_1 \dots n_{k-1} \dots\rangle = c N_i |n_1 \dots n_{k-1} \dots\rangle$$

$$a_k N_i |n_1 \dots n_k \dots\rangle = n_i a_k |n_1 \dots n_k \dots\rangle = c N_i |n_1 \dots n_{k-1} \dots\rangle$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned}N_i a_k - a_k N_i &= 0 & i \neq k \\ N_i a_k^\dagger - a_k^\dagger N_i &= 0 & i \neq k\end{aligned}}$$

Para  $k=i$ ,

$$N_i a_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle = c N_i |n_1 \dots n_{i-1} \dots\rangle = c (n_i - 1) |n_1 \dots n_{i-1} \dots\rangle$$

$$a_i N_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle = a_i n_i |n_1 \dots n_i \dots\rangle = c n_i |n_1 \dots n_{i-1} \dots\rangle$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned}N_i a_i - a_i N_i &= -a_i \\ N_i a_i^\dagger - a_i^\dagger N_i &= a_i^\dagger\end{aligned}}$$

Por outro lado,  $\mu \neq i$

$$a_k N_i = a_k a_i^\dagger a_i = \mu a_i^\dagger a_k a_i = \pm \mu a_i^\dagger a_i a_k = \pm \mu N_i a_k$$

$$N_i a_k - a_k N_i = N_i a_k (1 \mp \mu) = 0 \Rightarrow \mu = \pm 1$$

e temos os seguintes conjuntos de regras de comutação:

CASO BOSE-EINSTEIN

$$a_k^\dagger a_l^\dagger - a_l^\dagger a_k^\dagger = 0$$

$$a_k a_l - a_l a_k = 0$$

$$a_k a_l^\dagger - a_l^\dagger a_k = \delta_{kl} I$$

CASO FERMÍ-DIRAC

$$a_k^\dagger a_l^\dagger + a_l^\dagger a_k^\dagger = 0$$

$$a_k a_l + a_l a_k = 0$$

$$a_k a_l^\dagger + a_l^\dagger a_k = \delta_{kl} I$$

É fácil mostrar que  $n_i = 0, 1, 2, \dots$  para Bosons. No entanto, para Fermions  $n_i = 0$  ou  $1$  apenas. De fato,

$$a_i^\dagger |0\rangle = \psi_i^{(1)} = |0 \dots n_i=1 \dots 0 \dots\rangle$$

Mas,  $\mu = -1$   $a_k^\dagger a_l^\dagger + a_l^\dagger a_k^\dagger = 0 \Rightarrow a_k^{+2} = 0$  e

Não conseguimos construir estados com duas partículas com mesmo subnível  $k_i$ , que é o Princípio de Exclusão de Pauli.

Finalmente, como  $N_i = a_i^\dagger a_i$ ,

$$\langle n_1 \dots n_i \dots | N_i | n_1 \dots n_i \dots \rangle = n_i =$$

$$\langle n_1 \dots n_i \dots | a_i^\dagger a_i | n_1 \dots n_i \dots \rangle = | \langle a_i | n_1 \dots n_i \dots \rangle |^2.$$

A norma do estado  $a_i | \dots \rangle$  é  $\sqrt{n_i}$  e então

$$a_i | n_1 \dots n_i \dots \rangle = \sqrt{n_i} e^{i\alpha} | n_1 \dots n_{i-1} \dots \rangle.$$

Da mesma forma, usando  $a_i a_i^\dagger = \pm a_i^\dagger a_i + 1$  (Bosons / Fermions),

$$a_i^\dagger | n_1 \dots n_i \dots \rangle = \sqrt{\pm n_i + 1} e^{i\beta} | n_1 \dots n_{i+1} \dots \rangle$$

Para Bosons podemos escolher as fases com zero,  $\alpha = \beta = 0$ . Para Fermions isso NÃO funciona. De fato, vamos tentar  $a_1^\dagger a_2^\dagger + a_2^\dagger a_1^\dagger = 0$  no vácuo:

$$0 = (a_1^\dagger a_2^\dagger + a_2^\dagger a_1^\dagger) | 0 \rangle = a_1^\dagger e^{i\beta_2} | 0 1 \dots \rangle + a_2^\dagger e^{i\beta_1} | 1 0 \dots \rangle$$

$$= e^{i\beta_2 + i\beta_1} | 1 1 \dots \rangle + e^{i\beta_1 + i\beta_2} | 1 1 \dots \rangle$$

Se as fases forem nulas isso NÃO dá zero. Uma regra que funciona é a seguinte. Definimos  $M_i = \sum_{j=1}^{i-1} N_j$ . O número  $m_i$  conta o número de partículas com índice menor do que  $i$ . Se  $m_i$  é par a fase é zero, se  $m_i$  é ímpar a fase é  $\pi$ .

Assim:

$$a_1^\dagger a_2^\dagger | 0 \rangle = a_1^\dagger | 0 1 0 \dots \rangle = | 1 1 0 \dots \rangle$$

$$a_2^\dagger a_1^\dagger | 0 \rangle = a_2^\dagger | 1 0 0 \dots \rangle = - | 1 1 0 \dots \rangle.$$

## 4.4 Variáveis Dinâmicas

(98)

Em um sistema de partículas idênticas a Hamiltoniana deve depender das variáveis de um corpo de forma simétrica. No caso de três elétrons em um caixa e sujeito a um campo magnético constante  $B$ , por exemplo, teríamos

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{P_3^2}{2m} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} + \frac{e^2}{|r_2 - r_3|} + \frac{e^2}{|r_3 - r_1|} +$$

$$\mu B \cdot (L_1 + L_2 + L_3) + V B \cdot (S_1 + S_2 + S_3)$$

Os operadores

$$K = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{P_3^2}{2m}$$

$$\vec{L} = L_1 + L_2 + L_3$$

$$\vec{S} = S_1 + S_2 + S_3$$

são operadores aditivos de um corpo. Já o termo de interação

$$V = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} + \frac{e^2}{|r_2 - r_3|} + \frac{e^2}{|r_3 - r_1|}$$

é um operador aditivo de dois corpos, pois cada termo envolve duas partículas.

Em geral, podemos escrever o operador gênico  $K$ , que mede o valor total de um operador aditivo  $K$  de um corpo como

$$K = \sum_i K_i N_i = \sum_i K_i a_i^\dagger a_i = \sum_i \langle K_i | K | K_i \rangle a_i^\dagger a_i$$

Podemos representar  $K$  em uma base geral usando

$$a_i^\dagger = \sum_q b_q^\dagger \langle L_q | K_i \rangle$$

$$a_i = \sum_e b_e \langle K_i | L_e \rangle$$

$$K = \sum_{q,e} K_i b_q^\dagger b_e \langle L_q | K_i \rangle \langle K_i | L_e \rangle$$

$$K = \sum_{q,e} b_q^\dagger b_e \langle L_q | K | L_e \rangle$$

No caso de operadores aditivos de dois corpos, definiremos

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} N_i N_j V_{ij} + \sum_i \frac{N_i(N_i-1)}{2} V_{ii} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (N_i N_j - N_i \delta_{ij}) V_{ij}$$

Onde o fator  $1/2$  elimina a contagem dupla  $V_{ij} = V_{ji}$  e o segundo termo subtrai a auto-interação. O segundo termo conta o no de pares de partículas no nível  $i$ .

O operador

$$P_{ij} = N_i N_j - N_i \delta_{ij}$$

é chamado de operador de distribuição de pares e pode ser escrito em termos de  $a_i$  e  $a_i^\dagger$ :

$$P_{ij} = a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} = a_i^\dagger [\pm a_j^\dagger a_i + \delta_{ij}] a_j - a_i^\dagger a_j \delta_{ij}$$

$$= \pm a_i^\dagger a_j^\dagger a_i a_j = \pm a_i^\dagger a_j^\dagger [\pm a_j a_i]$$

$$= a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \quad \text{p/ bosons e fermions.}$$



Assim,

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i V_{ij}$$

Escrevendo em uma base genérica obtemos

$$V = \frac{1}{2} \sum_{qrst} b_q^\dagger b_r^\dagger b_s b_t \langle qr | V | ts \rangle$$

onde

$$\langle qr | V | ts \rangle \equiv \sum_{i,j} \langle L_q | K_i \rangle \langle L_r | K_j \rangle \langle K_j | L_s \rangle \langle K_i | L_t \rangle V_{ij}$$

Exemplo Se  $K = \sum_i K_i N_i$  então

$$\begin{aligned} K^2 &= \sum_{ij} K_i K_j N_i N_j = \sum_{ij} K_i K_j a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j \\ &= \sum_{ij} K_i K_j [a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i + a_i^\dagger a_i \delta_{ij}] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} (2K_i K_j) a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i + \sum_i K_i^2 a_i^\dagger a_i \end{aligned}$$

= operador de 2 corpos + operador de 1 corpo.

Usaremos essas construções para escrever a Hamiltoniana de um sistema de muitos corpos. Antes porém vamos estender a teoria para espectro contínuo, onde as somas viram integrais e os operadores  $a_i^\dagger$  e  $a_i$  se tornam campos.

- ① Verifique que o exemplo acima vale tanto para bósons quanto para férmions. ② Mostre que  $\langle qr | V | ts \rangle = \langle rq | V | st \rangle$ .

Exemplo - No caso do poço de potencial a base natural  $|k_n\rangle$  é tal que  $\langle x|k_n\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ .

Uma base alternativa é a base contínua  $|x\rangle$ , que trataremos em detalhes adiante. O operador aditivo energia cinética fica

$$K = \sum_n \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} a_n^\dagger a_n$$

Quando aplicado no estado  $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$  obtemos

$$\begin{aligned} K |n_1, n_2, \dots\rangle &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_1 + 4n_2 + 9n_3 + \dots) |n_1, n_2, \dots\rangle \\ &= \left( \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n_k \right) |n_1, n_2, \dots\rangle \end{aligned}$$

Se adicionarmos interação entre as partículas na forma

$$V(x_i, x_j) = \frac{V_0}{|x_i - x_j|}$$

podemos construir o operador aditivo de dois corpos da seguinte forma: dadas duas partículas nos estados  $|k_i\rangle$  e  $|k_j\rangle$  não podemos determinar o valor de  $V$ . No entanto, dadas duas partículas nos estados  $|x\rangle$  e  $|x'\rangle$  sabemos que

$$V(x, x') = \frac{V_0}{|x - x'|}$$

Assim,

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int dx dx' b_x^\dagger b_{x'}^\dagger b_{x'} b_x \frac{V_0}{|x-x'|}$$

Na base  $|k_i\rangle$  obtém

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{qrst} a_q^\dagger a_r^\dagger a_s a_t \langle qr | \mathcal{V} | ts \rangle$$

onde

$$\begin{aligned} \langle qr | \mathcal{V} | ts \rangle &= \int dx dx' \langle k_q | x \rangle \langle k_r | x' \rangle \langle x' | k_s \rangle \langle x | k_t \rangle \frac{V_0}{|x-x'|} \\ &= \int dx dx' \psi_q^*(x) \psi_r^*(x') \frac{V_0}{|x-x'|} \psi_s(x') \psi_t(x) \end{aligned}$$

Exercício: Escreva o operador  $K$  na base de operadores  $b_x^\dagger, b_x$ .

Solução

$$\begin{aligned} K &= \int dx dx' b_x^\dagger \langle x | -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} | x' \rangle b_{x'} \\ &= \int dx b_x^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) b_x \end{aligned}$$

Note que a posição do operador  $\partial^2/\partial x^2$  entre  $b_x^\dagger$  e  $b_x$  é relevante.

## 4.5 - Espectro Contínuo e Operadores de Campo

Desde o início desse capítulo assumimos que o conjunto completo de observáveis de uma partícula,  $K$ , tivesse espectro discreto. Vamos agora estender o tratamento para o caso de espectro contínuo. Substituiremos  $K$  por operadores  $x$  e  $\sigma$ , tal como posição (contínuo) e spin (discreto), de forma que

$$\langle x' \sigma' | x'' \sigma'' \rangle = \delta(x' - x'') \delta_{\sigma' \sigma''}.$$

Substituímos os operadores discretos  $a_i^\dagger$  e  $a_i$  por:

$$a_i^\dagger \longrightarrow \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(r_i)$$

$$a_i \longrightarrow \hat{\Psi}_\sigma(r_i)$$

que são operadores de campo que criam ou destroem uma partícula com número quântico  $\sigma$  na posição  $r_i$ . As relações de comutação são modificadas da seguinte forma:

BOSE-EINSTEIN

FERMI-DIRAC

$$\hat{\Psi}_{\sigma'}(r') \hat{\Psi}_{\sigma''}(r'') \mp \hat{\Psi}_{\sigma''}(r'') \hat{\Psi}_{\sigma'}(r') = 0$$

$$\hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r') \hat{\Psi}_{\sigma''}^\dagger(r'') \mp \hat{\Psi}_{\sigma''}^\dagger(r'') \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r') = 0$$

$$\hat{\Psi}_{\sigma'}(r') \hat{\Psi}_{\sigma''}^\dagger(r'') \mp \hat{\Psi}_{\sigma''}^\dagger(r'') \hat{\Psi}_{\sigma'}(r') = \delta(r' - r'') \delta_{\sigma' \sigma''}$$

Os operadores são também modificados:

$$\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(r) \hat{\Psi}_\sigma(r) = \text{densidade de partículas em } r \text{ com número quântico } \sigma$$

$$N = \sum_{\sigma'} \int d^3r' \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r') \hat{\Psi}_{\sigma'}(r') = \text{operador cujos autovalores são o número total de partículas.}$$

$$K = \sum_{\sigma' \sigma''} \int d^3r' d^3r'' \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(r') \langle r' \sigma' | K | r'' \sigma'' \rangle \hat{\Psi}_{\sigma''}(r'')$$

= operador Aditivo de 1 corpo

$$V = \sum_{\substack{\sigma' \sigma'' \\ \sigma''' \sigma''''}} \frac{1}{2} \int d^3r' d^3r'' d^3r''' d^3r'''' \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(r') \hat{\Psi}_{\sigma''}^+(r'') \hat{\Psi}_{\sigma'''}(r''') \hat{\Psi}_{\sigma''''}(r'''' ) \\ \times \langle r' \sigma'; r'' \sigma'' | V | r''' \sigma''', r'''' \sigma'''' \rangle$$

= operador de dois corpos .

Os estados

$$\hat{\Psi}_{\sigma_n}^+(r_n) \hat{\Psi}_{\sigma_{n-1}}^+(r_{n-1}) \dots \hat{\Psi}_{\sigma_1}^+(r_1) | 0 \rangle$$

formam uma base no espaço de n partículas, de forma que um estado  $\Psi^{(n)}$  pode ser representado por

$$\Psi(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2, \dots, r_n, \sigma_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \hat{\Psi}_{\sigma_1}(r_1) \hat{\Psi}_{\sigma_2}(r_2) \dots \hat{\Psi}_{\sigma_n}(r_n) | \Psi^{(n)} \rangle$$

Veja que  $\Psi$  é simétrica nos trocas de quaisquer 2 índices no caso BE e antissimétrica no caso FD (prove!). Essa forma está, portanto, automaticamente simetrizada e estados sem a simetria correta simplesmente não aparecem. Veremos a seguir a forma explícita dessas funções de onda.

Podemos inventar essa relação e escrever

$$|\Psi^{(n)}\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \frac{1}{\sqrt{n!}} \int d^3r_1 \dots d^3r_n \hat{\Psi}_{\sigma_n}^+(r_n) \dots \hat{\Psi}_{\sigma_1}^+(r_1) |0\rangle \Psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_n, \sigma_n)$$

Embora essa expressão pareça natural, precisamos provar que está correta.

Em primeiro lugar vamos mostrar que

$$F_n \equiv \langle 0 | \hat{\Psi}_{\sigma_1}^+(r_1) \dots \hat{\Psi}_{\sigma_n}^+(r_n) \Psi_{\sigma'_1}^+(r'_1) \dots \Psi_{\sigma'_n}^+(r'_n) |0\rangle \\ = \sum_{P_n} \text{sgn}(P_n) \delta(r_1 - r'_1) \dots \delta(r_n - r'_n) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \dots \delta_{\sigma_n \sigma'_n}$$

onde  $P_n$  são as permutações sobre os índices  $(r_1, \sigma_1, \dots, r_n, \sigma_n)$  e  $\text{sgn}(P_n)$  é +1 para permutações pares e -1 para ímpares, para FD. Para BE  $\text{sgn}(P_n) = +1$  sempre.

Exemplo:  $n=3$ ; existem  $n! = 6$  permutações:

3 pares  $P_{123} = I, P_{231}, P_{312}$

3 ímpares  $P_{213}, P_{321}, P_{132}$

$$P_{231}(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2, r_3, \sigma_3) = (r_2, \sigma_2, r_3, \sigma_3, r_1, \sigma_1)$$

$$P_{213}(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2, r_3, \sigma_3) = (r_2, \sigma_2, r_1, \sigma_1, r_3, \sigma_3)$$

A prova é feita por indução:

$$F_1 = \langle 0 | \hat{\Psi}_{\sigma_1}^+(r_1) \hat{\Psi}_{\sigma'_1}^+(r'_1) |0\rangle = \langle 0 | \pm \Psi_{\sigma'_1}^+(r'_1) \Psi_{\sigma_1}(r_1) + \delta(r_1 - r'_1) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} |0\rangle \\ = \delta(r_1 - r'_1) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1}, \quad \text{pois } \Psi_{\sigma_1}(r_1) |0\rangle = 0$$

Para  $F_2$  temos: (vamos omitir o rótulo  $r$ )

$$\begin{aligned}
F_2 &= \langle 0 | \Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma_2} \Psi_{\sigma_2}^+ \Psi_{\sigma_1}^+ | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \Psi_{\sigma_1} (\pm \Psi_{\sigma_2}^+ \Psi_{\sigma_2} + \delta(\sigma_2 - \sigma_2') \delta_{\sigma_2 \sigma_2'} \Psi_{\sigma_1}^+ | 0 \rangle \\
&= \pm \langle 0 | \Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma_2}^+ (\pm \Psi_{\sigma_1}^+ \Psi_{\sigma_2} + \delta(\sigma_1' - \sigma_2) \delta_{\sigma_1' \sigma_2}) | 0 \rangle \\
&\quad + \delta(\sigma_2 - \sigma_2') \delta_{\sigma_2 \sigma_2'} \langle 0 | \pm \Psi_{\sigma_1}^+ \Psi_{\sigma_1} + \delta(\sigma_1' - \sigma_1) \delta_{\sigma_1' \sigma_1} | 0 \rangle \\
&= \pm \langle 0 | \Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma_2}^+ | 0 \rangle \delta(\sigma_1' - \sigma_2) \delta_{\sigma_1' \sigma_2} + \delta(\sigma_2 - \sigma_2') \delta(\sigma_1' - \sigma_1) \delta_{\sigma_2 \sigma_2'} \delta_{\sigma_1' \sigma_1} \\
&= \pm \delta(\sigma_1 - \sigma_2') \delta(\sigma_1' - \sigma_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2'} \delta_{\sigma_1' \sigma_2} + \delta(\sigma_2 - \sigma_2') \delta(\sigma_1' - \sigma_1) \delta_{\sigma_2 \sigma_2'} \delta_{\sigma_1' \sigma_1} \\
&= \sum_{P_2} \text{sgn}(P_2) \delta(\sigma_1 - \sigma_1') \delta(\sigma_2 - \sigma_2') \delta_{\sigma_1 \sigma_1'} \delta_{\sigma_2 \sigma_2'}
\end{aligned}$$

Onde as permutações são a identidade,  $P_{12} = I$ , e  $P_{21}$ .

Da mesma forma mostra-se que a expressão vale para  $F_n$ .

Vamos agora provar a relação no topo da pag. 103. Escrevemos

$$|\Psi^{(n)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \int d^3r_1 \dots d^3r_n \Psi_{\sigma_n}^+ \dots \Psi_{\sigma_1}^+ |0\rangle f(r_1 \sigma_1, r_2 \sigma_2, \dots, r_n \sigma_n)$$

e substituímos na expressão a  $\Psi(r_i, \sigma_i, \dots, r_n \sigma_n)$ :

$$\begin{aligned}
\Psi(r_1 \sigma_1, \dots, r_n \sigma_n) &= \frac{1}{n!} \sum_{\sigma_1' \dots \sigma_n'} \int d^3r_1' \dots d^3r_n' F_n f(r_1' \sigma_1' \dots r_n' \sigma_n') \\
&= \frac{1}{n!} \sum_{P_n} \text{sgn}(P_n) f(r_1 \sigma_1, \dots, r_n \sigma_n)
\end{aligned}$$

Isso mostra que a expressão para  $\Psi$  é a soma sobre todas as permutações de  $f(r_1 \sigma_1, \dots, r_n \sigma_n)$ , que nada mais é que uma particular enumeração dos partículas do sistema.

Note que o número de termos na soma  $\sum_{P_n}$  é  $n!$ .

Finalmente a função  $f(r_1, r_1, \dots, r_n, r_n)$  que aparece dentro

de  $|\Psi^{(n)}\rangle$  pode ser substituída por  $\frac{1}{n!} \sum_{P_n} \text{sgn}(P_n) f(r_1, r_1, \dots, r_n, r_n)$ , pois cada um desses  $n!$  termos é igual ao outro, devido às permutações dos operadores  $\Psi^\dagger$ . Dessa forma segue a fórmula no topo da pag. 103.

É fácil ver daí e de  $F_n$  que

$$\langle \Psi^{(n)} | \Psi^{(n)} \rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \int d^3r_1 \dots d^3r_n |\Psi(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2, \dots, r_n, \sigma_n)|^2$$

A última propriedade que mostraremos nessa seção é como calcular valores esperados de operadores aditivos de um corpo. No caso de espectro discreto um operador desse tipo é escrito como

$$K = \sum_i k_i a_i^\dagger a_i$$

No caso de espectro contínuo, se  $K(r, p)$  é um operador de uma partícula, então

$$K = \sum_{\sigma'} \int d^3r' \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r') K(r', -i\hbar \nabla') \hat{\Psi}_{\sigma'}(r')$$

---

$$\langle \Psi^{(n)} | K | \Psi^{(n)} \rangle = \sum_{j=1}^n \sum_{\substack{\sigma_1, \sigma_2, \\ \dots, \sigma_n}} \int d^3r_1 \dots d^3r_n \Psi_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n}^*(r_1, r_2, \dots, r_n) K(r_j, -i\hbar \nabla_j) \Psi_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n}(r_1, r_2, \dots, r_n)$$

---

Vamos provar essa fórmula explicitamente para o caso  $n=2$ . Usando

$|\Psi^{(n)}\rangle$  como na pag. 103 temos



$$\langle \Psi^{(2)} | K | \Psi^{(2)} \rangle = \sum_{\substack{\sigma_1, \sigma_2 \\ \sigma'_1, \sigma'_2 \\ \sigma'}} \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r'_1 d^3r'_2 d^3r' \Psi^*(r'_1, \sigma'_1, r'_2, \sigma'_2) \times$$

$$\langle 0 | \hat{\Psi}_{\sigma_1}^\dagger(r_1) \hat{\Psi}_{\sigma_2}^\dagger(r_2) \hat{\Psi}_{\sigma'_1}^\dagger(r') K(r', -i\hbar\beta) \hat{\Psi}_{\sigma_1}(r_1) \hat{\Psi}_{\sigma_2}^\dagger(r_2) \hat{\Psi}_{\sigma'_1}^\dagger(r') | 0 \rangle \times \Psi(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2)$$

Os três últimos operadores à direita podem ser manipulados de forma a passar  $\hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r')$  para a direita: omitindo o argumento  $r'$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\sigma_1}^\dagger \hat{\Psi}_{\sigma_2}^\dagger \hat{\Psi}_{\sigma'_1}^\dagger &= [\pm \hat{\Psi}_{\sigma_2}^\dagger \hat{\Psi}_{\sigma'_1}^\dagger + \delta(r_2 - r') \delta_{\sigma_2 \sigma'_1}] \hat{\Psi}_{\sigma_1}^\dagger \\ &= \pm \hat{\Psi}_{\sigma_2}^\dagger [\pm \hat{\Psi}_{\sigma_1}^\dagger \hat{\Psi}_{\sigma'_1}^\dagger + \delta(r_1 - r') \delta_{\sigma_1 \sigma'_1}] + \delta(r_2 - r') \delta_{\sigma_2 \sigma'_1} \hat{\Psi}_{\sigma_1}^\dagger \\ &= \pm \hat{\Psi}_{\sigma_2}^\dagger \delta(r_1 - r') \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} + \hat{\Psi}_{\sigma_1}^\dagger \delta(r_2 - r') \delta_{\sigma_2 \sigma'_1} \end{aligned}$$

Pois o termo desmontado será aplicado em  $|0\rangle$ , dando 0. As deltas matam a integral e soma em  $r'$  e  $\sigma'$

Os três operadores à esquerda tem o mesmo comportamento, sendo essencialmente o conjugado hermitiano dos que à direita. Obtemos

$$\hat{\Psi}_{\sigma_1} \hat{\Psi}_{\sigma_2} \hat{\Psi}_{\sigma'_1} = \pm \hat{\Psi}_{\sigma_2} \delta(r'_1 - r_1) \delta_{\sigma'_1 \sigma_1} + \hat{\Psi}_{\sigma_1} \delta(r'_2 - r_2) \delta_{\sigma'_1 \sigma_2}$$

O produto desses operadores vai gerar 4 termos onde ainda aparecem

$$\hat{\Psi}_a \hat{\Psi}_b = \pm \hat{\Psi}_b \hat{\Psi}_a + \delta(r_a - r_b) \delta_{\sigma_a \sigma_b} = \delta(r_a - r_b) \delta_{\sigma_a \sigma_b} \text{ após aplicar em } |0\rangle:$$

$$(ii) [\pm \hat{\Psi}_{\sigma_2} \delta(r'_1 - r_1) \delta_{\sigma'_1 \sigma_1}] [\pm \hat{\Psi}_{\sigma'_1} \delta(r_1 - r'_1) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1}] \rightarrow \delta(r_1 - r'_1) \delta(r'_1 - r_1) \delta(r_2 - r'_2) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \delta_{\sigma'_1 \sigma_1} \delta_{\sigma_2 \sigma'_2}$$

contribui com  $\frac{1}{2} \Psi^*(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2) K(r_1, -i\hbar\beta) \Psi(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2)$

$$(ii) \left[ \Psi_{\sigma_1}^{\dagger} \delta(r_2' - r_1') \delta_{\sigma_2' \sigma_1'} \right] \left[ \Psi_{\sigma_1}^{\dagger} \delta(r_2 - r_1') \delta_{\sigma_2 \sigma_1'} \right] \rightarrow$$

$$\delta(r_2' - r_1') \delta(r_2 - r_1') \delta(r_1' - r_1) \delta_{\sigma_2' \sigma_1'} \delta_{\sigma_2 \sigma_1'} \delta_{\sigma_1' \sigma_1}$$

contribui com  $\frac{1}{2} \Psi^{\dagger}(r_1, \sigma_1, r_2, r_2) K(r_2, -i\hbar D_2) \Psi(r_1, \sigma_1, r_2, r_2)$

$$(iii) \left[ \pm \Psi_{\sigma_2}^{\dagger} \delta(r_1' - r_1') \delta_{\sigma_1' \sigma_2'} \right] \left[ \Psi_{\sigma_1}^{\dagger} \delta(r_2 - r_1') \delta_{\sigma_2 \sigma_1'} \right] \rightarrow$$

$$\delta(r_1' - r_1') \delta(r_2 - r_1') \delta(r_2' - r_1) \delta_{\sigma_1' \sigma_2'} \delta_{\sigma_2 \sigma_1'} \delta_{\sigma_2' \sigma_1}$$

contribui com  $\pm \frac{1}{2} \Psi^{\dagger}(r_2, r_2, r_1, \sigma_1) K(r_2, -i\hbar D_2) \Psi(r_1, \sigma_1, r_2, r_2)$

$$= \frac{1}{2} \Psi^{\dagger}(r_1, \sigma_1, r_2, r_2) K(r_2, -i\hbar D_2) \Psi(r_1, \sigma_1, r_2, r_2)$$

$$(iv) \left[ \Psi_{\sigma_1}^{\dagger} \delta(r_2' - r_1') \delta_{\sigma_2' \sigma_1'} \right] \left[ \pm \Psi_{\sigma_2}^{\dagger} \delta(r_1 - r_1') \delta_{\sigma_1 \sigma_2'} \right] \rightarrow$$

$$\delta(r_2' - r_1') \delta(r_1 - r_1') \delta(r_1' - r_2) \delta_{\sigma_2' \sigma_1'} \delta_{\sigma_1 \sigma_2'} \delta_{\sigma_1' \sigma_2}$$

contribui com  $\pm \frac{1}{2} \Psi^{\dagger}(r_2, r_2, r_1, \sigma_1) K(r_1, -i\hbar D_1) \Psi(r_1, \sigma_1, r_2, r_2)$

$$= \frac{1}{2} \Psi^{\dagger}(r_1, \sigma_1, r_2, r_2) K(r_1, -i\hbar D_1) \Psi(r_1, \sigma_1, r_2, r_2)$$

Assim (i) = (iv) e (ii) = (iii). Os fatores 1/2 vieram de

segue o resultado da pag. 105, com uma soma sobre o número de partículas do sistema.

Da mesma forma, se  $V$  é um potencial de dois corpos dependente só das posições,

$$\langle \psi^{(n)} | V | \psi^{(n)} \rangle = \sum_{i \neq j=1}^n \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \int d^3r_1 \dots d^3r_n |\psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_n, \sigma_n)|^2 V(r_i, r_j)$$

### 4.6 - Dinâmica Quântica de Partículas Idênticas

Vamos inicialmente obter as equações de movimento na representação de Heisenberg para o caso de espectro discreto. Assim  $a_i$  e  $a_i^\dagger$  serão funções do tempo e suas relações de comutação devem valer para todo  $t$ .

Suponha que o Hamiltoniano seja da forma

$$H = \sum_{k,l} \langle k | H_0 | l \rangle a_k^\dagger a_l + \frac{1}{2} \sum_{qrst} a_q^\dagger a_r^\dagger \langle qr | V | ts \rangle a_s a_t$$

↓  
ENERGIA cinética + potencial externo

↓  
Termo de interação de 2 partículas

Precisamos calcular:

$$[a_j, a_k^\dagger a_l] = a_l \delta_{kj}$$

$$[a_j, a_q^\dagger a_r^\dagger a_s a_t] = a_r^\dagger a_s a_t \delta_{qj} + a_q^\dagger a_t a_s \delta_{rj}$$

Prova

$$\begin{aligned}
[a_j, a_k^\dagger a_e] &= a_k^\dagger [a_j, a_e] + [a_j, a_k^\dagger] a_e \\
&= a_k^\dagger \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ -2a_e a_j \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \delta_{jk} \\ -2a_k^\dagger a_j + \delta_{jk} \end{array} \right\} a_e \left\{ \begin{array}{l} \leftarrow BE \\ \leftarrow FD \end{array} \right. \\
&= \left\{ \begin{array}{l} a_e \delta_{jk} \\ a_e \delta_{jk} - 2a_k^\dagger (a_e a_j + a_j a_e) \end{array} \right\} = a_e \delta_{jk}
\end{aligned}$$

0 pl FD

PAM BE apenas (FD fica como exercicio)

$$\begin{aligned}
[a_j, a_q^\dagger a_r^\dagger a_s a_t] &= a_q^\dagger [a_j, a_r^\dagger a_s a_t] + [a_j, a_q^\dagger] a_r^\dagger a_s a_t \\
&= a_q^\dagger a_s a_t \delta_{jq} + a_q^\dagger a_r^\dagger a_s \underbrace{[a_j, a_t]}_0 \\
&\quad + a_q^\dagger \underbrace{[a_j, a_r^\dagger a_s]}_{a_s \delta_{jr}} a_t \\
&= a_r^\dagger a_s a_t \delta_{jq} + a_q^\dagger a_t a_s \delta_{jr}
\end{aligned}$$

Assim temo

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{da_j}{dt} = [a_j, H] &= \sum_e \langle j | H_0 | e \rangle a_e + \frac{1}{2} \sum_{rst} a_r^\dagger a_s a_t \langle jr | V | st \rangle \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{qst} a_q^\dagger a_t a_s \underbrace{\langle qj | V | st \rangle}_{= \langle jr | V | st \rangle} \\
&\hspace{15em} \text{(veja eqs 99 e 100)}
\end{aligned}$$

trocando q → r e s ↔ t no ultimo termo

$$i\hbar \frac{da_j}{dt} = \sum_e \langle j | H_0 | e \rangle a_e + \sum_{rst} a_r^\dagger a_s a_t \langle jr | V | st \rangle$$

Se escolhemos uma representação onde a interação é

diagonal,

$$\langle j|r|V|st\rangle = V_{jr} \delta_{js} \delta_{rt} \quad \text{em } \hbar\omega$$

$$i\hbar \frac{da_j}{dt} = \sum_e \langle j|H_0|e\rangle a_e + \sum_r a_r^\dagger a_r a_j V_{jr}$$

No caso de espectro contínuo onde os operadores de partícula única são  $r$  e  $\sigma$  em equação fica

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_\sigma(r,t)}{\partial t} = \sum_{\sigma'} \int d^3r' \langle r|\sigma|H_0|r'\sigma'\rangle \hat{\Psi}_{\sigma'}(r',t) + \sum_{\sigma'} \int d^3r' V(r,r') \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r',t) \hat{\Psi}_{\sigma'}(r',t) \hat{\Psi}_\sigma(r,t)$$

com  $V(r,r') = V(r',r)$ .

Se  $H_0$  só depende de  $r$  e  $p$ , como  $p^2/2m + V(r)$ , então

$$\langle r|\sigma|H_0|r'\sigma'\rangle = H_0(r, -i\hbar\nabla) \delta(r-r') \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_\sigma(r,t)}{\partial t} = H_0(r, -i\hbar\nabla) \hat{\Psi}_\sigma(r,t) + \left[ \sum_{\sigma'} \int d^3r' V(r,r') \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r',t) \hat{\Psi}_{\sigma'}(r',t) \right] \hat{\Psi}_\sigma(r,t)$$

que é uma equação integro-diferencial não linear. Se não houver interação entre as partículas,  $V=0$ , voltamos na equação usual de Schrödinger para os campos:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_\sigma(r,t)}{\partial t} = H_0(r, -i\hbar\nabla) \hat{\Psi}_\sigma(r,t)$$

Quando  $V \neq 0$  aparece um "potencial efetivo"

$$V_{\text{ef}}(r, \sigma) = \sum_{\sigma'} \int d^3 r' V(r, r') \rho_{\sigma'}(r', t)$$

$$\rho_{\sigma'}(r', t) \equiv \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(r', t) \hat{\Psi}_{\sigma'}(r', t) = \text{densidade de partículas em } r' \text{ com número quântico } \sigma'$$

No entanto,  $V_{\text{ef}}$  só pode ser calculado se  $\hat{\Psi}$  e  $\hat{\Psi}^\dagger$  são conhecidos. Os métodos de solução desses problemas são ditos "auto-consistentes": inicia-se com uma solução aproximada, calcula-se  $V_{\text{ef}}$  e com isso recalcula-se  $\Psi$  e  $\Psi^\dagger$ . Depois recalcula-se  $V_{\text{ef}}$  e assim por diante, até que as soluções converjam.

Vamos agora reescrever a equação de movimento de representação de Schrödinger. Escrevemos

$$\Psi(r_1, \sigma_1, r_2, \sigma_2, \dots, r_n, \sigma_n, t) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \hat{\Psi}_{\sigma_1} \dots \hat{\Psi}_{\sigma_n} | \Psi^{(n)} \rangle$$

e calculamos  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ . Os termos de lado direito vão dar

$$\sum_{j=1}^n \left[ \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \hat{\Psi}_{\sigma_1} \dots i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\sigma_j}}{\partial t} \dots \hat{\Psi}_{\sigma_n} | \Psi^{(n)} \rangle \right].$$

Substituindo

$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\sigma_j}}{\partial t}$  aparecem dois termos: o primeiro é simples e resulta

$$\sum_{j=1}^n H_0(r_j, -i\hbar \nabla_j) \Psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_n, \sigma_n, t).$$

Os termos de interação são mais difíceis de calcular. Vamos tomar  $j=3$  para exemplificar. Obtemos

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \psi_{\sigma_1} \psi_{\sigma_2} \left[ \sum_{\sigma_1} \int d^3r' V(r_3, r') \psi_{\sigma_1}^\dagger \psi_{\sigma_1} \right] \psi_{\sigma_3} \dots | \psi^{(n)} \rangle$$

Usando as relações de comutação para Bos-Einstein vemos que

$$\hat{\psi}_{\sigma_1} \hat{\psi}_{\sigma_2} \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger = \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger \psi_{\sigma_1} \psi_{\sigma_2} + \hat{\psi}_{\sigma_2} \delta(r_1 - r_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} + \hat{\psi}_{\sigma_1} \delta(r_1 - r_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2}$$

Quando aplicamos em  $\langle 0 |$  vemos que o primeiro termo se anula. Os outros dois são

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ V(r_3, r_2) \langle 0 | \hat{\psi}_{\sigma_2} \hat{\psi}_{\sigma_1} \psi_{\sigma_3} \dots | \psi^{(n)} \rangle + V(r_3, r_2) \langle 0 | \hat{\psi}_{\sigma_1} \hat{\psi}_{\sigma_2} \psi_{\sigma_3} \dots | \psi^{(n)} \rangle \right]$$

$$= \sum_{e=1}^2 V(r_3, r_e) \psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_n, \sigma_n)$$

O resultado geral é

$$\sum_{j=1}^n \sum_{e=1}^{j-1} V(r_j, r_e) \psi = \frac{1}{2} \sum_{j, e \neq j} V(r_j, r_e) \psi$$

↓ forma que a equação completa fica

$$i \hbar \frac{\partial \psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_n, \sigma_n, t)}{\partial t} = \left[ \sum_{j=1}^n H_0(r_j, -i \hbar \nabla_j) + \frac{1}{2} \sum_{j, e \neq j} V(r_j, r_e) \right] \psi$$

A equação vale também p/ Fermi-Dirac. Mostre isso.