Gás de Férmions Não-Interagentes - Função de Distribuição de Pares

Mar de Fermi $\to$ Estado Fundamental de N partículas

$$|\phi_0(N)\rangle = \prod_{|\vec{k}|\leq k_F} a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} |0\rangle =$$

k_F $\to$ raio da superfície de Fermi ($T=0$)

* Operadores Campo

$$\left.\begin{aligned} \psi_\sigma(\vec{x}) &= \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})\, a_{\vec{k}\sigma} \\ \psi^{\dagger}_\sigma(\vec{x}) &= \sum_{\vec{k}} \varphi^{*}_{\vec{k}}(\vec{x})\, a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} \end{aligned}\right\} \qquad \varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L} \quad ; \quad \begin{aligned} i &= 1,2,3 \\ n_i &= 0, \pm 1, \pm 2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Operador "Densidade de spin"

$$\hat{\rho}_\sigma(\vec{x}) = \psi^{\dagger}_\sigma(\vec{x})\, \psi_\sigma(\vec{x})$$ - densidade de partículas c/ spin σ

$$\hat{\rho}_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \varphi^{*}_{\vec{k}}(\vec{x})\, \varphi_{\vec{k}'}(\vec{x})\, a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}'\sigma}$$

$$\int_V d^3x\, \hat{\rho}_\sigma(\vec{x}) = \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left\{ \int_V d^3x\, \varphi^{*}_{\vec{k}}(\vec{x})\, \varphi_{\vec{k}'}(\vec{x}) \right\} a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}'\sigma}$$

$$= \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \underbrace{\left\{ \frac{1}{V} \int d^3x\, e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}} \right\}}_{\delta_{\vec{k}\vec{k}'}} a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}'\sigma}$$

$$= \sum_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} = \hat{N}_\sigma$$ - nº de partículas c/ spin σ

P/ o estado fundamental tem-se que:

$$a_{\vec{k}\sigma} |\phi_0(N)\rangle = 0 \quad , p/ \quad |\vec{k}| > k_F$$

$$a^{+}_{\vec{k}\sigma} |\phi_0(N)\rangle = 0 \quad , p/ \quad |\vec{k}| < k_F$$

Estaremos interessados em valores médios de operadores densidade desse modo é útil definir as <u>matrizes densidade reduzidas</u> (tendo em conta que a informação sobre o estado do sistema encontra-se na matriz densidade, ρ):

(I) $$\langle \vec{x}_1' \sigma_1' | \hat{\rho}_1 | \vec{x}_1 \sigma_1 \rangle \equiv \mathrm{Tr}[\rho \hat{\rho}_1] = \mathrm{Tr}[\underbrace{\rho}_{|\phi_0(N)\rangle\langle\phi_0(N)|} \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi_{\sigma_1'}(\vec{x}_1')]$$

(II) $$\langle \vec{x}_1' \sigma_1' \vec{x}_2' \sigma_2' | \hat{\rho}_2 | \vec{x}_1 \sigma_1 \vec{x}_2 \sigma_2 \rangle \equiv \mathrm{Tr}[\rho \hat{\rho}_2] = \mathrm{Tr}[\rho \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi^{+}_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \psi_{\sigma_2'}(\vec{x}_2') \psi_{\sigma_1'}(\vec{x}_1' \ldots$$

Os elementos diagonais de (I) e (II) definem <u>funções de distribuição</u> tais que quando integradas sobre os conjuntos $\{\vec{x}_i \sigma_i\}$ pertinentes produzem

(III) $$D_1(\vec{x}_1, \sigma_1) = \langle \vec{x}_1 \sigma_1 | \hat{\rho}_1 | \vec{x}_1 \sigma_1 \rangle = \mathrm{Tr}[\rho \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi_{\sigma_1}(\vec{x}_1)]$$

$$\rightarrow \sum_{\sigma_1} \int d^3x_1\, D_1(\vec{x}_1, \sigma_1) = \mathrm{Tr}\{\rho \sum_{\sigma_1} \underbrace{\int d^3x_1\, \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi_{\sigma_1}(\vec{x}_1)}_{\hat{N}_{\sigma_1}}\}$$

$$= \mathrm{Tr}\{\rho \sum_{\sigma_1} \hat{N}_{\sigma_1}\}$$

$$= \mathrm{Tr}\{\rho \hat{N}\} \equiv [N]$$ - <u>nº médio de partículas</u>

No nosso caso $[N]$ está fixo: $[N] = N$

(IV) $$D_2(\vec{x}_1 \sigma_1, \vec{x}_2 \sigma_2) = \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \hat{\rho}_2 | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle = \mathrm{Tr}[\rho \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi^{+}_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \psi_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \psi_{\sigma_1}(\ldots$$

Vejamos que p/ férmions:

$$\psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi^{+}_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \psi_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \psi_{\sigma_1}(\vec{x}_1) = \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi^{+}_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \psi_{\sigma_2}(\vec{x}_1) - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) \psi_{\sigma_2'}(\ldots$$

Disso decorre que:

$$D_2(\vec{x}_1\sigma_1,\vec{x}_2\sigma_2) = Tr[\rho\, \psi^+_{\sigma_1}(\vec{x}_1)\psi_{\sigma_1}(\vec{x}_1)\psi^+_{\sigma_2}(\vec{x}_2)\psi_{\sigma_2}(\vec{x}_2)] - \delta_{\sigma_1\sigma_2}\delta(\vec{x}_1-\vec{x}_2)\, Tr[\rho\, \psi^+_{\sigma_1}(\vec{x}_1)\psi_{\sigma_2}(\vec{x}_2)]$$

$$\Rightarrow \sum_{\sigma_1\sigma_2}\int d^3x_1\int d^3x_2\, D(\vec{x}_1\sigma_1,\vec{x}_2\sigma_2) = Tr\left\{\rho[\hat{N}^2-\hat{N}]\right\} = \underbrace{[\hat{N}^2]}_{N^2} - \underbrace{[N]}_{N} = N(N-1)$$

Com isso vemos que D_1 e D_2 são de fato funções de distribuição. Vamos calculá-las então usando a base de ondas planas (normalizadas no volume de uma caixa $- V = L^3$):

(I) $\langle \vec{x}_1'\sigma_1'|\hat{\rho}_1|\vec{x}_1\sigma_1\rangle = Tr\{\rho\,\psi^+_{\sigma_1}(\vec{x}_1)\psi_{\sigma_1'}(\vec{x}_1')\}$; $\psi^+_{\sigma_1}(\vec{x}_1) = \sum_{\vec{k}}\frac{1}{L^{3/2}}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_1}a^+_{\vec{k}\sigma_1}$

$$\psi_{\sigma_1'}(\vec{x}_1') = \sum_{\vec{k}'}\frac{1}{L^{3/2}}e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}_1'}a_{\vec{k}'\sigma_1'}$$

$$\Rightarrow \langle \vec{x}_1'\sigma_1'|\hat{\rho}_1|\vec{x}_1\sigma_1\rangle = \frac{1}{L^3}\sum_{\vec{k},\vec{k}'}e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{x}_1'-\vec{k}\cdot\vec{x}_1)}\, Tr\{\rho\,\underbrace{a^+_{\vec{k}\sigma_1}a_{\vec{k}'\sigma_1'}}_{\text{assoc. ao nº de partículas}}\}$$

De fato vemos que:

$$Tr\{\rho\, a^+_{\vec{k}\sigma_1}a_{\vec{k}'\sigma_1'}\} = \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\underbrace{[n_{\vec{k}\sigma_1}]}_{\text{ocupação média de um estado }(\vec{k},\sigma_1)}$$

Isso implica que:

$$\langle \vec{x}_1'\sigma_1'|\hat{\rho}_1|\vec{x}_1\sigma_1\rangle = \frac{1}{L^3}\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\sum_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}_1'-\vec{x}_1)}[n_{\vec{k}\sigma_1}]$$

$$= \delta_{\sigma_1\sigma_1'}\, g(|\vec{x}_1'-\vec{x}_1|) \quad ; \quad g(|\vec{x}_1'-\vec{x}_1|) = \frac{1}{L^3}\sum_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}_1'-\vec{x}_1)}[n_{\vec{k}\sigma_1}]$$

A função $g(|\vec{x}'-\vec{x}|)$ é a chamada <u>função de correlação</u> e pode ser calculada tomando o limite p/ o contínuo dos $\vec{k}$: $\sum_{\vec{k}} \to \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\int d^3k$.

(VI) $\langle \vec{x}_1' \sigma_1' \vec{x}_2' \sigma_2' | \hat{\rho}_2 | \vec{x}_1 \sigma_1 \vec{x}_2 \sigma_2 \rangle = \mathrm{Tr}\{\rho\, \psi^{+}_{\sigma_1}(\vec{x}_1)\, \psi^{+}_{\sigma_2}(\vec{x}_2)\, \psi_{\sigma_2'}(\vec{x}_2')\, \psi_{\sigma_1'}(\vec{x}_1')\}$

Vejamos então que usando os operadores campo tal como antes teremos:

$$\langle \vec{x}_1' \sigma_1' \vec{x}_2' \sigma_2' | \hat{\rho}_2 | \vec{x}_1 \sigma_1 \vec{x}_2 \sigma_2 \rangle = \frac{1}{L^6} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \vec{k}_1' \vec{k}_2'}} e^{-i(\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2)}\, e^{i(\vec{k}_1' \cdot \vec{x}_1' + \vec{k}_2' \cdot \vec{x}_2')} \times$$

$$\underbrace{\mathrm{Tr}\{\rho\, a^{+}_{\vec{k}_1 \sigma_1} a^{+}_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_2' \sigma_2'} a_{\vec{k}_1' \sigma_1'}\}}_{[a^{+}_{\vec{k}_1 \sigma_1} a^{+}_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_2' \sigma_2'} a_{\vec{k}_1' \sigma_1}] \text{ - valor médio}}$$

Sendo o traço invariante por representação, podemos calcular o valor médio acima na base de estados de ocupação de férmions (espaço de Fock). Nessa base vemos que os únicos termos relevantes, isto é c/ contribuições não-nulas, virão dos termos abaixo:

Termo direto: $\vec{k}_1', \sigma_1' = \vec{k}_1, \sigma_1$ e $\vec{k}_2', \sigma_2' = \vec{k}_2, \sigma_2$ (i)

Termo de troca: $\vec{k}_1', \sigma_1' = \vec{k}_2, \sigma_2$ e $\vec{k}_2', \sigma_2' = \vec{k}_1, \sigma_1$ (ii)

Daí vem que:

(i)
$$\Rightarrow a^{+}_{\vec{k}_1 \sigma_1} a^{+}_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_1 \sigma_1} = -a^{+}_{\vec{k}_1 \sigma_1} \{ \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} - a_{\vec{k}_1 \sigma_1} a^{+}_{\vec{k}_2 \sigma_2} \} a_{\vec{k}_2 \sigma_2}$$
$$= \hat{N}_{\vec{k}_1 \sigma_1} \hat{N}_{\vec{k}_2 \sigma_2} - \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \hat{N}_{\vec{k}_1 \sigma_1}$$

(ii)
$$\Rightarrow a^{+}_{\vec{k}_1 \sigma_1} a^{+}_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_1 \sigma_1} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} = a^{+}_{\vec{k}_1 \sigma_1} \{ -a_{\vec{k}_1 \sigma_1} a^{+}_{\vec{k}_2 \sigma_2} + \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \} a_{\vec{k}_2 \sigma_2}$$
$$= -\hat{N}_{\vec{k}_1 \sigma_1} \hat{N}_{\vec{k}_2 \sigma_2} + \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \hat{N}_{\vec{k}_1 \sigma_1}$$

Daí vem que:

(VII) $$\langle \vec{x}_1' \sigma_1' \vec{x}_2' \sigma_2' | \hat{\rho}_2 | \vec{x}_1 \sigma_1 \vec{x}_2 \sigma_2 \rangle = \frac{1}{L^6} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \vec{k}_1' \vec{k}_2'}} e^{-i(\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2)}\, e^{i(\vec{k}_1' \cdot \vec{x}_1' + \vec{k}_2' \cdot \vec{x}_2')} \times$$

$$(\delta_{\vec{k}_1' \vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2' \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_1'} \delta_{\sigma_2 \sigma_2'} - \delta_{\vec{k}_2 \vec{k}_1'} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2'} \delta_{\sigma_1' \sigma_2} \delta_{\sigma_2' \sigma_1})\, \mathrm{Tr}\{\rho\, \hat{N}_{\vec{k}_1 \sigma_1} \hat{N}_{\vec{k}_2 \sigma_2}\}$$

Usando o fato de o traço ser cíclico, isto é:

$$Tr(ABC) = Tr(CAB) = Tr(BCA),$$

mas também a propriedade de ρ (p/ o gás ideal de férmions não-interagentes)

$$\rho^2 = |\phi_0(N)\rangle \underbrace{\langle\phi_0(N)|\phi_0(N)\rangle}_{=1} \langle\phi_0(N)| = |\phi_0(N)\rangle\langle\phi_0(N)| = \rho,$$

encontramos:

$$Tr\{\rho \hat{N}_{\vec{k}_1\sigma_1} \hat{N}_{\vec{k}_2\sigma_2}\} = Tr\{\rho \hat{N}_{\vec{k}_1\sigma_1}\} Tr\{\rho \hat{N}_{\vec{k}_2\sigma_2}\} = [\hat{N}_{\vec{k}_1\sigma_1}][\hat{N}_{\vec{k}_2\sigma_2}]$$

$$= [n_{\vec{k}_1\sigma_1}][n_{\vec{k}_2\sigma_2}]$$ - produto de 2 ocupações médias de estados de 1 partícula.

Relembrando a nossa definição de função de correlação,

$$g(|\vec{x}' - \vec{x}|) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.(\vec{x}'-\vec{x})} [n_{\vec{k}\sigma}],$$

encontramos o seguinte na equação (VII):

$$(\text{VIII}) \quad \langle \vec{x}_1'\sigma_1' \vec{x}_2'\sigma_2' | \hat{\rho}_2 | \vec{x}_1\sigma_1 \vec{x}_2\sigma_2 \rangle = \delta_{\sigma_1'\sigma_1}\delta_{\sigma_2'\sigma_2}\, g(|\vec{x}_1' - \vec{x}_1|)\, g(|\vec{x}_2' - \vec{x}_2|) - \delta_{\sigma_1'\sigma_2}\delta_{\sigma_2'\sigma_1}\, g(|\vec{x}_2' - \vec{x}_1|)\, g(|\vec{x}_1' - \vec{x}_2|)$$

//

Vemos então que como consequência da indistinguibilidade das partículas (e das relações de comutação dos operadores $a_{\vec{k}\sigma}$ e $a^{+}_{\vec{k}\sigma}$) surge o termo de interação repulsiva acima. Da equação (VIII) segue que a função distribuição de pares (termos diagonais - $\vec{x}_1' = \vec{x}_1$, $\vec{x}_2' = \vec{x}_2$, $\sigma_1' = \sigma_1$ e $\sigma_2' = \sigma_2$) é tal que:

$$(\text{IX}) \quad D(\vec{x}_1\sigma_1, \vec{x}_2\sigma_2) = [g(0)]^2 - \delta_{\sigma_1\sigma_2}[g(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)]^2$$ - correlação espacial entre férmions

//

Daí vemos que p/ férmions c/ spins opostos não ocorre correlação espacial!

Por questão de completeza vamos calcular $g(|\vec{x}'-\vec{x}|)$:

$$g(|\vec{x}'-\vec{x}|) = \frac{1}{L^3}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.(\vec{x}'-\vec{x})} [n_{\vec{k}\sigma}]$$

$$\downarrow \sum_{\vec{k}} \to \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k$$

$$(\mathrm{X}) \qquad g(|\vec{x}'-\vec{x}|) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\, e^{i\vec{k}.(\vec{x}'-\vec{x})} [n_{\vec{k}\sigma}]$$

Lembrando que p/ férmions a ocupação média de um estado $(\vec{k}\sigma)$ é dada pela distribuição de Fermi-Dirac,

$$[n_{\vec{k}\sigma}] = \bar{n}(\epsilon_k) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k-\mu)}+1},$$

que a temperatura $T=0$ é:

$$n(\epsilon_k) = \begin{cases} 1 \,, & \epsilon_k \leq \epsilon_F \\ 0 \,, & \epsilon_k > \epsilon_F \end{cases}$$

Então a equação (X) fica:

$$(\mathrm{XI}) \qquad g(|\vec{x}'-\vec{x}|) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F}\int_{-1}^{+1}\int_0^{2\pi} e^{i\vec{k}.(\vec{x}'-\vec{x})} k^2\, dk\, d\cos\theta\, d\phi$$

Escolhendo $k_z \,//\, \vec{r} = \vec{x}'-\vec{x}$ na integral ficamos com:

$$\underset{T=0}{g(r)} = \frac{\cancel{2\pi}}{(2\pi)^{\cancel{3}\,2}}\int_0^{k_F}\int_{-1}^{+1} e^{ikru} k^2\, dk\, du \quad ; \quad r = |\vec{x}'-\vec{x}|$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} k^{\cancel{2}} \left[\frac{e^{ikr}-e^{-ikr}}{i\cancel{k}r}\right] dk = \frac{1}{2\pi^2 r}\int_0^{k_F} k\,\mathrm{sen}(kr)\, dk \xrightarrow{kr = x}$$

$$\Rightarrow g_{T=0}(r) = \frac{1}{2\pi^2 r^3}\int_0^{k_F r} x \,\mathrm{sen}\, x \, dx$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 r^3}\left\{ -x\cos x \Big|_0^{k_F r} + \int_0^{k_F r} \cos x \, dx \right\}$$

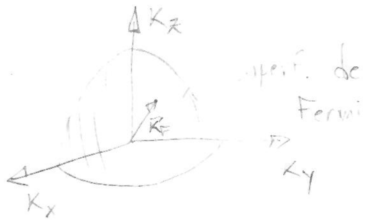
$$= \frac{1}{2\pi^2 r^3}\left\{ \mathrm{sen}(k_F r) - k_F r \cos(k_F r) \right\}$$

$$= \frac{k_F^3}{2\pi^2 (k_F r)}\left\{ \frac{\mathrm{sen}(k_F r)}{(k_F r)^2} - \frac{\cos(k_F r)}{k_F r} \right\}$$

$$= \frac{k_F^3}{2\pi^2 (k_F r)}\, j_1(k_F r) \quad ; \quad j_1(k_F r) \text{ - Função de Bessel esférica de ordem 1}$$

Podemos ainda expressar k_F em termos do número de partículas calculando o número total de estados acessíveis do sistema (contando a degenerescência de spin)

$$N = \frac{\overbrace{\frac{4}{3}\pi k_F^3}^{\text{vol. da superf. de Fermi}}}{\underbrace{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}_{\text{volume da cel. unitária no } \vec{K}\text{-espaço}}}\;\underbrace{(2S+1)}_{\text{degenerescência de spin}}$$



$$\Rightarrow N = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \frac{V}{(2\pi)^3}(2S+1) \longrightarrow k_F^3 = \frac{6\pi^2}{2S+1}\underbrace{\left(\frac{N}{V}\right)}_{\text{dens. de partículas}}$$