

VII.3) Quantização de Campos

i) O campo de Schrödinger

Se encararmos a equação de movimento para o operador de campo $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ de um sistema de partículas sujeitas a um potencial externo $U(\mathbf{x})$,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) + U(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t),$$

como a versão quântica de uma equação de movimento clássica, podemos imaginá-la como sendo derivada de uma hamiltoniana deste campo clássico $\psi(\mathbf{x}, t)$ e, conseqüentemente, quantizá-la segundo as relações canônicas de quantização. Convém notar que nesta abordagem $\psi(\mathbf{x}, t)$ é um campo clássico complexo ao invés da representação de coordenadas do estado físico $|\psi\rangle$. As equações dinâmicas que regem as duas grandezas são as mesmas apenas no caso de sistemas não interagentes como ficará mais claro adiante.

Para tal, vamos expandir este campo clássico, $\psi(\mathbf{x}, t)$, numa base ortogonal $\{\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\}$,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}(t) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$$

e, então,

$$\sum_{\mathbf{k}} i\hbar \frac{d\alpha_{\mathbf{k}}(t)}{dt} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) \right\} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \alpha_{\mathbf{k}}(t).$$

Assim, escolhendo a base $\{\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\}$ tal que $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_{\mathbf{k}} + U \varphi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}$ teremos

$$i\hbar \frac{d\alpha_{\mathbf{k}}(t)}{dt} = \epsilon_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}(t),$$

ou

$$\frac{d\alpha_{\mathbf{k}}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \epsilon_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}(t) \quad \text{e} \quad \frac{d\alpha_{\mathbf{k}}^*(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^*(t). \quad (\text{VII.3.1})$$

As equações para $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ e $\alpha_{\mathbf{k}}^*(t)$ podem ainda ser reescritas como

$$\frac{d\alpha_{\mathbf{k}}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \alpha_{\mathbf{k}}^*} \quad \text{e} \quad \frac{d\alpha_{\mathbf{k}}^*}{dt} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial \alpha_{\mathbf{k}}}, \quad (\text{VII.3.2})$$

onde $H \equiv \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}}$. Ou ainda,

$$\frac{d\alpha_{\mathbf{k}}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial (i\hbar \alpha_{\mathbf{k}}^*)} \quad \text{e} \quad \frac{d(i\hbar \alpha_{\mathbf{k}}^*)}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \alpha_{\mathbf{k}}},$$

o que nos permite identificar $q_{\mathbf{k}} \equiv \alpha_{\mathbf{k}}(t)$ e $p_{\mathbf{k}} \equiv i\hbar \alpha_{\mathbf{k}}^*$ como variáveis canonicamente conjugadas e H como a hamiltoniana clássica do sistema considerado.

O processo de quantização canônica nos diz que devemos promover $q_{\mathbf{k}}$ e $p_{\mathbf{k}}$ a operadores e impor a regra de comutação $[q_{\mathbf{k}}, p_{\mathbf{k}}] = i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Desta forma

$$[a_{\mathbf{k}}, i\hbar a_{\mathbf{k}}^\dagger] = i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad \text{ou} \quad [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'},$$

onde $\alpha_{\mathbf{k}} \rightarrow a_{\mathbf{k}}$ e $\alpha_{\mathbf{k}}^* \rightarrow a_{\mathbf{k}}^\dagger$.

Conseqüentemente a hamiltoniana do sistema se transforma em $H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$ cujo espectro pode ser facilmente obtido como $\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{n_1 \dots n_\infty}$, correspondendo aos auto estados

$$|n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \dots, n_{\mathbf{k}_\infty}\rangle = \frac{a_{\mathbf{k}_1}^{\dagger n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{a_{\mathbf{k}_2}^{\dagger n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots \frac{a_{\mathbf{k}_\infty}^{\dagger n_\infty}}{\sqrt{n_\infty!}} |0\rangle.$$

Se ao invés de relações de comutação impusermos relações de anticomutação obteremos um espectro de férmions onde $n_i = 0$ ou 1 .

Assim, concluímos que o espectro da hamiltoniana quântica equivalente àquela clássica que gera a equação de movimento (Schrödinger) do campo clássico $\psi(\mathbf{x}, t)$, é composto de bósons ou férmions no potencial externo $U(\mathbf{x})$. Esta é a origem do termo “2ª quantização” já que estamos tratando de uma equação de movimento que carrega \hbar como uma equação de movimento de um campo clássico.

ii) O campo escalar

Seguindo o exemplo anterior, vamos quantizar o campo escalar que tem como equação de movimento

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} + \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}, t) = 0,$$

que representa a dinâmica do “deslocamento” $\varphi(t)$ na posição \mathbf{x} (limite contínuo de um sólido isotrópico).

Expandindo $\varphi(\mathbf{x}, t)$ em ondas planas

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ \Rightarrow \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{d^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t)}{dt^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad \text{e} \quad \nabla^2 \varphi = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t) (-k^2) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ \Rightarrow \frac{d^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t)}{dt^2} &+ (kc)^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t) = 0, \end{aligned}$$

ou

$$\frac{d^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t)}{dt^2} + \omega_k^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t) = 0,$$

onde $\omega_k = kc$, que é a equação de movimento da “coordenada” de um oscilador harmônico que rotulamos pelo vetor de onda \mathbf{k} . Esta equação é equivalente ao par de equações de Hamilton

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t)}{dt} = \tilde{p}_{\mathbf{k}}(t) \\ \frac{d\tilde{p}_{\mathbf{k}}(t)}{dt} = -\omega_k^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}(t) \end{cases}$$

Por outro lado, como $\varphi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}$ devemos ter

$$\begin{aligned} \varphi^*(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}}^*(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \varphi(\mathbf{x}, t) \\ \Rightarrow \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}^*(t) &= \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}}(t). \end{aligned}$$

Desta forma podemos gerar as equações de Hamilton derivando

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\tilde{p}_{\mathbf{k}} \tilde{p}_{-\mathbf{k}} + \omega_k^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}}) \quad (\in \mathbb{R})$$

com respeito a $\tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}}$ ou $\tilde{p}_{-\mathbf{k}}$, ou seja,

$$\frac{\partial H}{\partial \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}}} = \omega_k^2 \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad \frac{\partial H}{\partial \tilde{p}_{-\mathbf{k}}} = \tilde{p}_{\mathbf{k}} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial H}{\partial \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}}} = -\dot{\tilde{p}}_{\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad \frac{\partial H}{\partial \tilde{p}_{-\mathbf{k}}} = \dot{\tilde{\varphi}}_{\mathbf{k}},$$

e assim, $\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}$ e $\tilde{p}_{-\mathbf{k}}$ são canonicamente conjugadas.

Então, podemos passar diretamente para o caso quântico onde agora

$$H = \frac{\hbar}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\tilde{p}_{\mathbf{k}} \tilde{p}_{-\mathbf{k}}}{\hbar} + \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{\hbar} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}} \right)$$

é um operador e $[\tilde{p}_{-\mathbf{k}}, \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}] = -i\hbar$, ou melhor, $[\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}, \tilde{p}_{\mathbf{k}'}] = i\hbar \delta_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}}$. Vamos, então, definir o operador

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}} &\equiv \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} + \frac{i}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}\hbar}} \tilde{p}_{\mathbf{k}} \quad \Rightarrow \quad a_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}^{\dagger} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}\hbar}} \tilde{p}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &= \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}\hbar}} \tilde{p}_{-\mathbf{k}} \quad \text{ou} \quad a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}\hbar}} \tilde{p}_{\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

Assim,

$$\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^{\dagger})$$

e

$$\tilde{p}_{\mathbf{k}} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} (a_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}).$$

As relações de comutação $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}]$ podem ser obtidas através de

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] &= \left[\sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} + \frac{i}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}\hbar}} \tilde{p}_{\mathbf{k}}, \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}'}}{2\hbar}} \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}'} - \frac{i}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}'}\hbar}} \tilde{p}_{-\mathbf{k}'} \right] \\ &= \frac{-i}{2} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}'}}} \frac{1}{\hbar} \underbrace{[\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}, \tilde{p}_{-\mathbf{k}'}]}_{i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} + \frac{i}{2} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}}}} \frac{1}{\hbar} [\tilde{p}_{\mathbf{k}}, \tilde{\varphi}_{-\mathbf{k}'}] \\ &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \end{aligned}$$

e, obviamente, $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = [a_{\mathbf{k}}^{\dagger}, a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = 0$.

Em termos de $a_{\mathbf{k}}$ e $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ podemos escrever H como

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2} (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

Como os auto estados de $a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}$ são da forma $|n_{\mathbf{k}}\rangle$ tal que $a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} |n_{\mathbf{k}}\rangle = n_{\mathbf{k}} |n_{\mathbf{k}}\rangle$, vemos que o espectro de H é $\sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}$. Este 2º termo é infinito pois representa a soma das energias de ponto zero de infinitos osciladores. Então, se postularmos a energia do vácuo $|0\rangle$ como nula, teremos

$$\begin{aligned} H |n_{\mathbf{k}_1} \dots n_{\mathbf{k}_\infty}\rangle &= (n_{\mathbf{k}_1} \hbar\omega_{\mathbf{k}_1} + n_{\mathbf{k}_2} \hbar\omega_{\mathbf{k}_2} + \dots) |n_{\mathbf{k}_1} \dots n_{\mathbf{k}_\infty}\rangle \\ &\Rightarrow \begin{cases} n_{\mathbf{k}_1} & \text{quanta com energia } \hbar\omega_{\mathbf{k}_1} \\ n_{\mathbf{k}_2} & \text{quanta com energia } \hbar\omega_{\mathbf{k}_2} \\ \vdots & \vdots \end{cases} \end{aligned}$$

Para dar a estes quanta a interpretação corpuscular devemos estudar outro operador importante do sistema; o momentum total \mathbf{P} .

Como sabemos, \mathbf{P} é o gerador das transformações espaciais

$$e^{+i\mathbf{P}\cdot\mathbf{a}/\hbar}\varphi(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{P}\cdot\mathbf{a}/\hbar} = \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a})$$

(φ é o operador de campo)

$$\Rightarrow [\mathbf{P}, \varphi] = -i\hbar\nabla\varphi$$

como $\varphi = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ temos $-i\hbar\nabla\varphi = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ onde $\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}$ é agora um operador. Assim, devemos ter $[\mathbf{P}, \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}] = \hbar\mathbf{k}\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}$. Escrevendo $\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}$ em termos de $a_{\mathbf{k}}$ e $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ podemos facilmente constatar que este operador, \mathbf{P} , é dado por

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \text{constante}$$

onde o termo constante é o momentum total de $|0\rangle$ que também postulamos como nulo.

Então os $n_{\mathbf{k}}$ quanta em $|n_{\mathbf{k}}\rangle$ também transportam momentum linear $n_{\mathbf{k}}\hbar\mathbf{k}$. Assim, podemos encarar cada quantum de energia $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ e momentum $\hbar\mathbf{k}$ como uma partícula (energia e momentum bem definidos) e os auto estados de H e \mathbf{P} são dados por $|n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \dots, n_{\mathbf{k}_\infty}\rangle$ ou seja:

$n_{\mathbf{k}_1}$ partículas com energia $\hbar\omega_{\mathbf{k}_1}$ e momentum $\hbar\mathbf{k}_1$ etc. Neste caso particular, estas partículas são chamadas de bosons escalares, por exemplo, fônons em um sólido isotrópico (limite contínuo).

A decomposição $\varphi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ fica então

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}(t) + a_{-\mathbf{k}}^\dagger(t) \right) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right). \end{aligned}$$

A evolução temporal de $a_{\mathbf{k}}(t)$ é trivial; $a_{\mathbf{k}}(t) = a_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}$, o que nos leva a

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\mathcal{V}\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)} + a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)} \right),$$

que no limite $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ transforma-se em

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)} + a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)} \right).$$

Podemos interpretar a combinação $\sqrt{\hbar/2\mathcal{V}\omega_{\mathbf{k}}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)}$, ou sua versão contínua, como a função de onda do bóson escalar aqui introduzido, apesar de esta interpretação não estar completamente livre de críticas.

iii) O campo eletromagnético (gauge de Coulomb)

Como já é do nosso conhecimento, as equações para os potenciais escalar, $\varphi(\mathbf{x}, t)$, e vetor, $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$, são escritas no gauge de Coulomb como,

$$\begin{aligned} \nabla^2\varphi(\mathbf{x}, t) &= 4\pi\rho(\mathbf{x}, t) \quad \text{e} \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{4\pi}{c^2} \mathbf{J}_\perp(\mathbf{x}, t), \end{aligned}$$

onde $\rho(\mathbf{x}, t)$ e $\mathbf{J}_\perp(\mathbf{x}, t)$ são, respectivamente, a densidade de carga e densidade de corrente transversa. No vácuo, essas duas quantidades são nulas e, portanto,

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{e} \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0,$$

e toda a dinâmica está contida em $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$.

Expandindo $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ em ondas planas temos

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{A}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}.$$

Como $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ temos $i\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} = 0 \Rightarrow \mathcal{A}_{\mathbf{k}} = \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(1)} \hat{\xi}_{1\mathbf{k}} + \mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(2)} \hat{\xi}_{2\mathbf{k}}$ onde $\hat{\xi}_{1\mathbf{k}} \cdot \hat{\xi}_{2\mathbf{k}} = \hat{\xi}_{1\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} = \hat{\xi}_{2\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} = 0$. Assim, $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = A^{(1)}(\mathbf{x}, t) \hat{\xi}_1 + A^{(2)}(\mathbf{x}, t) \hat{\xi}_2$ onde

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A^{(1)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 A^{(1)}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{e} \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A^{(2)}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 A^{(2)}(\mathbf{x}, t) = 0,$$

e, então, para cada componente $\mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(1)}(t)$ e $\mathcal{A}_{\mathbf{k}}^{(2)}(t)$ podemos repetir o problema do campo escalar e decompor o campo eletromagnético como

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j\mathbf{k}} \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{2\mathcal{V}\omega_{\mathbf{k}}}} \left(a_{j\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)} + a_{j\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)} \right) \hat{\xi}_{j\mathbf{k}},$$

onde $j = 1, 2$. O termo $\sqrt{4\pi\hbar c^2}$ surge por questões dimensionais e as direções $\hat{\xi}_{j\mathbf{k}}$ são as direções de polarização do campo. Portanto, podemos escrever

$$H = \sum_{j\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{j\mathbf{k}}^\dagger a_{j\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad \mathbf{P} = \sum_{j\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k} a_{j\mathbf{k}}^\dagger a_{j\mathbf{k}}$$

onde $a_{j\mathbf{k}}^\dagger a_{j\mathbf{k}}$ é o número de fótons com momento linear $\hbar\mathbf{k}$ e energia $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \hbar ck$ polarizados na direção $\hat{\xi}_{j\mathbf{k}}$.

A fim de atribuir uma interpretação mais precisa para a polarização no regime quântico do campo eletromagnético devemos estudar o momento angular total do sistema. Usando que o momento angular total é o gerador das rotações do sistema, ou seja,

$$e^{i\mathbf{L}\cdot\hat{\mathbf{n}}\theta/\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{L}\cdot\hat{\mathbf{n}}\theta/\hbar} = R(\theta) \mathbf{A}(R^{-1}(\theta) \mathbf{x}),$$

onde $R(\theta)$ é a matriz de rotação de um ângulo θ em torno do eixo $\hat{\mathbf{n}}$ em $3 - D$, e seguindo o procedimento que usamos para obter a forma do momento linear total no espaço de Fock podemos mostrar que ($\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{k}}$)

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_{\text{orbital}} + \sum_{\mathbf{k}} \hbar (a_{R\mathbf{k}}^\dagger a_{R\mathbf{k}} - a_{L\mathbf{k}}^\dagger a_{L\mathbf{k}}) \hat{\mathbf{k}}$$

onde

$$a_{R\mathbf{k}} = \frac{a_{1\mathbf{k}} + ia_{2\mathbf{k}}}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad a_{L\mathbf{k}} = \frac{a_{1\mathbf{k}} - ia_{2\mathbf{k}}}{\sqrt{2}}$$

são, respectivamente, as polarizações trigonométrica (right-handed) e horária (left-handed) na direção de propagação do fóton. Desta forma vemos que o segundo termo da equação para \mathbf{L} nos permite atribuir ao fóton de radiação circularmente polarizada um momento angular intrínseco (spin) igual a $\pm\hbar$. O fato de o spin do fóton ter apenas dois valores decorre da condição de transversalidade ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$) do campo eletromagnético.

iv) Campos intergentes

a) Auto-interação

Como vimos anteriormente, uma equação de campo da forma

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t),$$

é obtida da hamiltoniana

$$\hat{H} = \sum_\alpha \int d^3r \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) + \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) U(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \right\},$$

que, por sua vez, representa um sistema de N partículas com $H = \sum_i [T(\mathbf{r}_i) + U(\mathbf{r}_i)]$. Assim sendo, essas partículas não interagem entre si e ocupam, obedecendo convenientemente a sua estatística, os estados de 1 corpo soluções de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_k(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k \varphi_k(\mathbf{r}),$$

onde k representa o conjunto de números quânticos compatíveis com a estatística das partículas e com a simetria do potencial externo $U(\mathbf{r})$.

Entretanto, ao ligarmos o potencial de interação entre as N partículas, $\hat{V} = (1/2) \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, a nossa hamiltoniana de campo adquire um termo adicional devido a esta auto-interação que, no espaço de Fock, vimos que pode ser representado por

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\alpha'} \int \int d^3r d^3r' \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\alpha'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}),$$

que se usado na expressão

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, t), \hat{H} \right],$$

nos daria uma contribuição não-linear e não-local na equação de movimento de $\hat{\psi}_\alpha$. Este novo termo resulta da interação entre as partículas que antes eram independentes.

Então, a inclusão de termos não-lineares na equação de movimento dos campos ou, equivalentemente, termos não-quadráticos ($\hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi}$) na Hamiltoniana nos leva à autointeração entre as partículas do sistema e, conseqüentemente, estes entes não mais representam os autoestados do sistema em questão.

Esta afirmação já foi comprovada explicitamente em sistemas de bósons e férmions massivos logo no começo do estudo da representação de operadores no espaço de Fock. Vamos agora ver um outro exemplo de autointeração no caso de bósons não-massivos.

Fônons, aproximação harmônica e termos anarmônicos:

Vamos imaginar um sistema de íons de mesma massa compondo um sólido tridimensional. A hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j),$$

onde $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_i^{(0)} + \mathbf{r}_i$, $\mathbf{R}_i^{(0)}$ é a posição de equilíbrio do i -ésimo íon e \mathbf{r}_i o seu deslocamento relativo à posição de equilíbrio. Assim, podemos escrever

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)} + \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j).$$

Assumindo que $\|\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}\| \gg \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|$, ou seja, pequenos deslocamentos iônicos, podemos usar a aproximação harmônica e escrever

$$H \approx \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left\{ V(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}) + \nabla V(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 V}{\partial r^{(\alpha)} \partial r^{(\beta)}} \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}} (r_i^{(\alpha)} - r_j^{(\alpha)}) (r_i^{(\beta)} - r_j^{(\beta)}) \right\}.$$

Como os $\mathbf{R}_i^{(0)}$ são as posições de equilíbrio dos íons, os termos envolvendo $\nabla V(\mathbf{r})$ são nulos se $\mathbf{r} = \mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}$. Definindo

$$\phi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\partial^2 V(\mathbf{r})}{\partial r^{(\alpha)} \partial r^{(\beta)}}$$

podemos escrever

$$H \approx \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V_0 + \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} r_i^{(\alpha)} D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}) r_j^{(\beta)}$$

onde V_0 é a energia de equilíbrio do sólido e $D_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}) = \delta_{ij} \sum_k \phi_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_k^{(0)}) - \phi_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)})$.

Esta hamiltoniana pode ser diagonalizada pela expansão

$$\mathbf{r}_i(t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_{\mathbf{k}\lambda}}} \left(a_{\mathbf{k}\lambda} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{(0)} - \omega_{\mathbf{k}\lambda}t)} + a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i^{(0)} - \omega_{\mathbf{k}\lambda}t)} \right) \hat{\xi}_{\mathbf{k}\lambda},$$

onde $\lambda = 1, 2, 3$ e $\mathbf{p}_i = m\dot{\mathbf{r}}_i$, o que resulta em

$$H = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \text{constante},$$

onde $\omega_{\mathbf{k}\lambda}$ é tal que $\overleftrightarrow{D} \cdot \xi = m\omega^2 \xi$.

Estes quanta de energia são os chamados *fônons*. Entretanto, se levarmos em conta os termos anarmônicos na expansão do potencial, os fônons não mais serão partículas não-interagentes. Por exemplo, se considerarmos o termo cúbico na hamiltoniana inicial teremos uma correção da forma,

$$\frac{1}{2 \times 3!} \sum_{i \neq j} \sum_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial^3 V(\mathbf{r})}{\partial r^{(\alpha)} \partial r^{(\beta)} \partial r^{(\gamma)}} \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}_i^{(0)} - \mathbf{R}_j^{(0)}} (r_i^{(\alpha)} - r_j^{(\alpha)}) (r_i^{(\beta)} - r_j^{(\beta)}) (r_i^{(\gamma)} - r_j^{(\gamma)}).$$

Expandindo os $r_i^{(\alpha)}$ em termos de operadores de criação e aniquilação como fizemos no caso harmônico, podemos escrever o termos acima como

$$\sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} M_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \left(a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} + a_{-\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger \right) \left(a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} + a_{-\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger \right) \left(a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3} + a_{-\mathbf{k}_3 \lambda_3}^\dagger \right),$$

onde M é o elemento de matriz do processo considerado que irá depender da 3ª derivada parcial de V , $\delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)$ exprime a conservação do momento linear total; $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$ e o processo em si é representado por produtos de a e a^\dagger . Por exemplo,

- i) $a_{-\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{-\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{-\mathbf{k}_3 \lambda_3}^\dagger$ corresponde à criação de 3 fônons,
- ii) $a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3}$ corresponde à aniquilação de 3 fônons,
- iii) $a_{-\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{-\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3}$ corresponde à aniquilação de 1 fônon seguida pela criação de outros dois e
- iv) $a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3}^\dagger$ corresponde à aniquilação de 2 fônons e criação de um 3º.

Vemos então que a perturbação ao deslocamento harmônico dos íons provoca uma interação entre os fônons. Desta forma seríamos levados a não tratar os estados excitados deste sistema como um conjunto de fônons não-interagentes.

Entretanto, se pensarmos em sistemas a temperaturas muito baixas, sabemos que apenas aqueles estados excitados próximos ao estado fundamental ($|0\rangle$ neste caso) serão importantes na determinação das propriedades termodinâmicas do sistema, o que implica na presença de fônons de baixa energia e em pequeno número.

Por outro lado, os processos de interação entre estas excitações elementares são, ou do tipo decaimento ou do tipo espalhamento. Os do primeiro tipo são importantes para fônons de alta energia enquanto que os do segundo tipo dependem da presença de um número grande de fônons no sistema. Desta forma, para baixas temperaturas, as propriedades termodinâmicas do sistema poderão ainda ser descritas por fônons não-interagentes.

Naturalmente estas excitações elementares não são autoestados do sistema, mas sim uma combinação linear de alguns deles com uma pequena dispersão em torno do valor médio de energia considerado. Este fato faz com que o tempo de vida do fônon seja muito longo, o que nos permite encará-lo como uma excitação elementar.

Esta argumentação é a base para a teoria de que os estados fracamente excitados de um sistema de muitos corpos (note que estamos falando de fracamente interagentes) podem ser descritos por uma coleção de "quase-partículas" ou "excitações elementares" com momento \mathbf{p} e energia $\epsilon(\mathbf{p})$ que não necessariamente coincide com o espectro $\epsilon_0(\mathbf{p})$ das partículas não-interagentes.

A estatística obedecida pelas quase-partículas tampouco precisa ser a mesma obedecida pelas partículas originais do problema. Como vimos anteriormente, os fônons são bósons enquanto os íons da rede podem ser átomos ionizados de spin 1/2.

O ponto importante é que estas quase-partículas são fracamente interagentes, só podendo abandonar o seu estado \mathbf{p} por decaimento ou espalhamento. Assim como no presente exemplo, os sistemas, em geral podem ser descritos por quase-partículas de vida longa.

O conceito de quase-partículas é de fundamental importância na descrição fenomenológica que Landau propôs para o líquido de Fermi. Trata-se de um sistema de férmions que interagem fortemente, como é o caso do ^3He . Landau propôs que a temperaturas abaixo de 100 mK (mas acima de 3 mK) todas as propriedades termodinâmicas deste sistema fossem obtidas através da existência de quase-partículas fermiônicas com espectro da forma $\epsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m^*$ onde m^* é a massa efetiva dessas quase-partículas. Assim, podemos imaginar um sistema de férmions fortemente interagentes como uma coleção de quase-partículas fracamente interagentes. Estas partículas só têm vida longa na vizinhança da superfície de Fermi por serem excitações elementares de baixa energia.

b) Interação entre campos

Como vimos anteriormente, termos não-lineares na equação de movimento de campos representam interação entre as partículas do sistema. Entretanto, há outras formas de acoplamento que podem existir. O exemplo que vamos estudar é o da interação entre dois campos distintos.

Eletrodinâmica não-relativística

O primeiro caso que estudaremos é o da interação radiação-matéria no limite não-relativístico. Neste caso,

$$H = \sum_i \left\{ \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right)^2 + U(\mathbf{r}_i) \right\} + \frac{1}{8\pi} \int d^3r \left\{ \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r})}{\partial t} \right)^2 + |\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})|^2 \right\} = H_P + H_{EM}$$

onde \mathbf{r}_i e \mathbf{p}_i são as posições e momentos das partículas e $U(\mathbf{r})$ é um potencial externo devido, por exemplo, a um átomo ou uma rede cristalina. H_P refere-se às partículas sujeitas ao campo eletromagnético (EM) e H_{EM} apenas ao campo EM. Escrevendo H_P no espaço de Fock temos,

$$\begin{aligned} H_P &= \sum_{\lambda\lambda'} b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} \langle \lambda | \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + U(\mathbf{r}) | \lambda' \rangle \\ &= \int d^3r \sum_{\lambda\lambda'} b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} \varphi_\lambda^*(\mathbf{r}) \left\{ \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \cdot \left(-i\hbar \nabla \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}) - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}) \right) + U(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}) \right\}. \end{aligned}$$

Escolhendo $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ como solução de

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi_\lambda(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\varphi_\lambda(\mathbf{r}) = \epsilon_\lambda\varphi_\lambda(\mathbf{r})$$

temos:

$$H_P = \sum_\lambda \epsilon_\lambda b_\lambda^\dagger b_\lambda + \sum_{\lambda\lambda'} b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} S_{\lambda\lambda'} + \sum_{\lambda\lambda'} b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'},$$

onde

$$S_{\lambda\lambda'} = \int d^3r \varphi_\lambda^*(\mathbf{r}) \frac{i\hbar e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r})$$

e

$$D_{\lambda\lambda'} = \int d^3r \varphi_\lambda^*(\mathbf{r}) \frac{e^2}{2mc^2} A^2(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'}(\mathbf{r}).$$

Até o momento estamos considerando o campo EM como clássico. Para estudar o problema na sua versão totalmente quântica devemos usar a expansão do potencial vetor em termos dos operadores de criação e destruição de fótons, ou seja,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j\mathbf{k}} \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{2V\omega_k}} \left(a_{j\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_k t)} + a_{j\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega_k t)} \right) \hat{\boldsymbol{\xi}}_{j\mathbf{k}},$$

e substituí-lo nas expressões para $S_{\lambda\lambda'}$ e $D_{\lambda\lambda'}$ definidas acima, o que nos levaria a processos do tipo:

- i) $b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} a_{j\mathbf{k}} \rightarrow$ transição com absorção de 1 fóton,
- ii) $b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} a_{j\mathbf{k}}^\dagger \rightarrow$ transição com emissão de 1 fóton,
- iii) $b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} a_{j\mathbf{k}} a_{j'\mathbf{k}'} \rightarrow$ transição com absorção de 2 fótons,
- iv) $b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} a_{j\mathbf{k}}^\dagger a_{j'\mathbf{k}'}^\dagger \rightarrow$ transição com emissão de 2 fótons,
- v) $b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} a_{j\mathbf{k}}^\dagger a_{j'\mathbf{k}'}$ \rightarrow espalhamento inelástico de 1 fóton.

As simetrias de $H_0 \equiv p^2/2m + U$ limitam os procesos possíveis e através destes processos podemos aplicar teoria das perturbações em $H_{int} = \sum_{\lambda\lambda'} b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} S_{\lambda\lambda'} + \sum_{\lambda\lambda'} b_\lambda^\dagger b_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}$ para descrever o fenômeno físico desejado até uma determinada ordem na constante de acoplamento.

Podemos ainda levar em conta efeitos de muitos corpos neste problema se considerarmos a presença do potencial \hat{V} de interação entre as partículas consideradas, o que tornaria o problema bem mais complexo. Neste caso podemos tratar $\hat{H}_0 + \hat{V}$ em teoria de perturbações em \hat{V} ou, a exemplo do que dissemos antes, considerar este sistema interagente através das suas quase-partículas.

Interação elétron-fônon

Outro exemplo muito importante de campos interagentes em física não-relativística de muitas partículas é o da interação elétron-fônon. Consideremos um sistema composto por muitos elétrons em uma rede cristalina. Sua hamiltoniana é dada por $H = H_e + H_{ion} + H_{ie}$, onde H_e é a hamiltoniana dos elétrons (interagentes ou não), H_{ion} é a hamiltoniana dos íons da rede (para a qual usaremos a aproximação harmônica) e H_{ie} é a interação elétron-fônon. Como já vimos acima, as hamiltonianas H_e e H_{ion} podem ser representadas em termos de operadores de criação e aniquilação de elétrons e fônons, respectivamente. Vamos, então, fazer o mesmo com H_{ie} .

Escrevendo explicitamente a interação elétron-fônon temos

$$H_{ie} = \sum_{ij} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$$

onde \mathbf{r}_i é a coordenada eletrônica, \mathbf{R}_j a do íon e V o potencial de interação. Vamos repetir o que fizemos anteriormente e analisar apenas pequenos deslocamentos dos íons e escrever

$$V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) = V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^{(0)} - \mathbf{Q}_j) \approx V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^{(0)}) - \mathbf{Q}_j \cdot \nabla V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^{(0)})$$

onde \mathbf{Q}_j é o deslocamento do íon de sua posição de equilíbrio $\mathbf{R}_j^{(0)}$. Assim,

$$H_{ie} = \sum_{ij} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^{(0)}) - \sum_{ij} \mathbf{Q}_j \cdot \nabla V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^{(0)}).$$

Como os termos somados em \mathbf{r}_i são operadores eletrônicos de 1 corpo, podemos escrever H_{ie} imediatamente em termos de operadores do campo eletrônico como

$$H_{ie} = \sum_{j\alpha} \int d^3r \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) - \sum_{j\alpha} \int d^3r \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \mathbf{Q}_j \cdot \nabla V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)}).$$

No primeiro termo, a soma em j de $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)})$ representa o potencial estático que a rede impõe ao elétron, ou seja, é o potencial externo $U(\mathbf{r})$. Portanto, podemos escrever $H = H_0 + H_f + H_{ef}$ onde $H = H_0$ é a hamiltoniana eletrônica na presença do potencial externo U , H_f é a hamiltoniana dos fônons na aproximação harmônica e H_{ef} é a interação elétron-fônon que é a segunda parte de H_{ie} onde escrevemos

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} V(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)})} \Rightarrow \nabla V = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} i\mathbf{k} V(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^{(0)})} \quad \text{e} \quad \mathbf{Q}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{Q}_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j^{(0)}}$$

o que nos leva

$$\sum_j \mathbf{Q}_j \cdot \nabla V = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sqrt{\frac{N}{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{k}) i\mathbf{k} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{k}'} \sum_j \frac{1}{N} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_j^{(0)}}$$

onde o somatório em j nos dá $\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{G}}$ e \mathbf{G} é um vetor da rede recíproca, ou seja, $\exp i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_j^{(0)} = 1$. Portanto,

$$H_{ie} = H_{ef} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}) i\mathbf{k} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{k} + \mathbf{G}}$$

onde

$$\hat{n}(\mathbf{k}) = \int d^3r e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\alpha} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r})$$

ou seja, a transformada de Fourier da densidade eletrônica $\hat{n}(\mathbf{r})$.

Usando a expansão de \mathbf{Q}_i em operadores de fônons temos

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k}} = \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2Nm\omega_{\mathbf{k}\lambda}}} (a_{\mathbf{k}\lambda} + a_{-\mathbf{k}\lambda}^\dagger) \hat{\xi}_{\mathbf{k}\lambda},$$

que levado na expressão de H_{ef} resulta em

$$H_{ef} = - \sum_{\mathbf{q}\mathbf{G}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\mathcal{V}\omega_{\mathbf{q}\lambda}}} \hat{n}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) V(\mathbf{q} + \mathbf{G}) i \{ (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \hat{\xi}_{\mathbf{q}\lambda} \} (a_{\mathbf{q}\lambda} + a_{-\mathbf{q}\lambda}^\dagger)$$

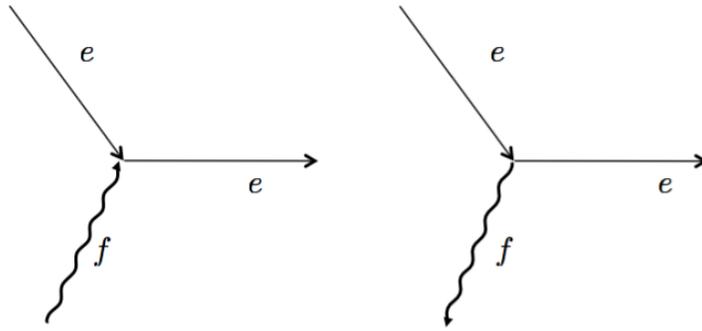
onde usamos que $Nm = \rho\mathcal{V}$.

Podemos ainda escrever, em alguns casos particulares, o operador $\hat{n}(\mathbf{q} + \mathbf{G})$ de forma simples, em termos dos operadores eletrônicos. No caso da "rede vazia" (U é apenas uma pequena perturbação para os elétrons),

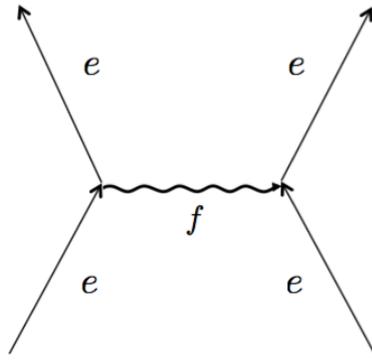
$$\hat{n}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{q}' + \mathbf{q} + \mathbf{G}}^\dagger c_{\mathbf{q}'}$$

onde c e c^\dagger são operadores eletrônicos.

No caso específico de $\mathbf{G} = 0$ (1ª zona de Brillouin) os processos de interação entre elétrons e fônons são da forma: $c_{\mathbf{q}' + \mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}\lambda}$ (gráfico da esquerda na figura abaixo) ou $c_{\mathbf{q}' + \mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}'} a_{-\mathbf{q}\lambda}^\dagger$ (gráfico da direita na figura abaixo).



Se usarmos teoria de perturbações em 2ª ordem no acoplamento $e - f$ teremos processos do tipo



onde a troca de 1 fônon induz uma interação efetiva entre os elétrons (lembre-se do processo de interação em um gás de elétrons). Esta interação efetiva pode sob certas condições se tornar atrativa, como ocorre em vários metais, o que nos leva à formação de pares de Cooper. Estes entes são fundamentais para a interpretação do fenômeno de supercondutividade.

A forma específica da interação elétron-fônon vai depender muito do sistema físico em questão e do grau de aproximação em que estivermos interessados. Vários acoplamentos podem resultar e, para exemplos particulares, sugerimos consultar o cap. I do livro *Many Particle Physics* (Mahan).

Como comentário final sobre interações é pertinente lembrar que os sistemas físicos a serem tratados nos levam naturalmente a várias aproximações, não só as mencionadas no parágrafo anterior, mas também a algumas outras que resultam em modelos bem conhecidos como os de Hubbard, Anderson, Kondo, Heisenberg, etc. Novamente sugerimos a referência acima para uma breve abordagem sobre a obtenção das hamiltonianas destes modelos.