

VII. Partículas Idênticas

Até o momento tratamos do problema de um corpo, ou seja, sistemas cuja função de onda ou, mais genericamente, o estado físico pode ser descrito por

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma} d^3x \psi(\mathbf{x}, \sigma) |\mathbf{x}\rangle \otimes |\sigma\rangle \quad (\text{VII.1})$$

onde $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow . Na realidade criamos uma formulação capaz de abordar problemas ainda mais gerais onde $|\sigma\rangle$ pode representar um produto tensorial de outros estados físicos e \mathbf{x} pode ser um vetor em D dimensões.

Vamos agora começar a abordar as questões relativas a sistemas físicos compostos por várias partículas cuja dinâmica é regida por uma hamiltoniana do tipo

$$H = \sum_i T(x_i) + \sum_i U(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(x_i, x_j) \quad (\text{VII.2})$$

onde $x_i = \mathbf{x}_i, \sigma_i$ e $i = 1, \dots, N$. Nesta hamiltoniana, T é o operador que representa a energia cinética de cada partícula, U é um potencial externo e V o potencial de interação entre as partículas. Em um sólido, por exemplo, \mathbf{x}_i é a coordenada de cada elétron, σ_i o seu spin, $U(x_i)$ o potencial cristalino e $V(x_i, x_j)$ a interação inter-eletrônica. Obviamente, um raciocínio análogo pode ser desenvolvido no caso de átomos e moléculas. Neste caso, o estado físico do sistema é descrito por

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \int \dots \int \prod_{i=1}^N d^3x_i \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \sigma_1 \dots \sigma_N) |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle \otimes |\sigma_1 \dots \sigma_N\rangle, \quad (\text{VII.3})$$

ou ainda,

$$|\psi\rangle = \int \dots \int \prod_{i=1}^N dx_i \psi(x_1, \dots, x_N) |x_1, \dots, x_N\rangle, \quad (\text{VII.4})$$

onde, como definimos acima, $x_i \equiv (\mathbf{x}_i, \sigma_i)$ e $\int \equiv \sum_{\sigma_i} \int d^3x_i$.

Os observáveis são, em geral, do tipo

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}}_1 &= \sum_i \hat{\mathcal{O}}(x_i) \longrightarrow \text{operadores de 1 corpo (} T \text{ e } U \text{ em (VII.2))} \\ \hat{\mathcal{O}}_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{\mathcal{O}}(x_i, x_j) \longrightarrow \text{operadores de 2 corpos (} V \text{ em (VII.2))} \\ \hat{\mathcal{O}}_3 &= \sum_{i < j < k} \hat{\mathcal{O}}(x_i, x_j, x_k) \longrightarrow \text{operadores de 3 corpos} \end{aligned}$$

etc. até $\hat{\mathcal{O}}_N$, que seria um operador de N corpos.

O que acontece com o sistema de N partículas idênticas é que, diferentemente do que ocorre em mecânica clássica, não podemos rotulá-las uma a uma. Portanto, a densidade de probabilidade de encontrarmos o sistema em uma configuração específica

$$|\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N)|^2 \quad (\text{VII.5})$$

é absolutamente indistinguível da densidade de probabilidade de encontrarmos o sistema na mesma configuração que a anterior exceto pela troca da i -ésima pela j -ésima partícula, que é descrita por

$$|\psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)|^2. \quad (\text{VII.6})$$

Portanto, a igualdade de (VII.5) e (VII.6) nos leva a concluir que a aplicação de um operador de permutação P_{ij} na função $\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N)$ é tal que

$$P_{ij}\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = e^{i\varphi_{ij}}\psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) \quad (\text{VII.7})$$

pois $|P_{ij}\psi|^2 = |\psi|^2$. Mas, por outro lado, esperamos que ao se aplicar P_{ij} novamente em (VII.7) tenhamos

$$P_{ij}^2\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = e^{2i\varphi_{ij}}\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = \psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (\text{VII.8})$$

o que nos leva a $\varphi_{ij} = 0$ ou π , ou seja

$$\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = \pm \psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N). \quad (\text{VII.9})$$

Convém notar que o resultado (VII.8) implicar em $\varphi_{ij} = 0$ ou π depende da topologia do espaço onde as partículas se encontram. Em 3-D não existe nenhum problema de caráter topológico que impeça esta identificação. Entretanto, em 2-D, estas questões topológicas podem gerar a noção de estatística generalizada para as partículas, o que não será o objetivo deste curso. Portanto, iremos nos restringir a partículas que obedecem a (VII.9).

Os operadores de N partículas, como $A(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N)$, são tais que

$$P_{ij}A(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = A(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)P_{ij} \quad (\text{VII.10})$$

pois

$$\begin{aligned} P_{ij}A(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N)\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) &= \\ A(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)\psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) &= \\ A(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)P_{ij}\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) & \end{aligned}$$

ou, de forma mais compacta, $PA = \tilde{A}P$. Se A é simétrico na troca de duas partículas, $A = \tilde{A}$ e

$$PA = AP \quad \Rightarrow \quad PA P^{-1} = A \quad (\text{VII.11})$$

onde P é qualquer operador de permutação de $M < N$ elementos. Note que $P_{ij\dots l}$ é tal que $j \leftrightarrow i$, $k \leftrightarrow j$ e assim sucessivamente que, por sua vez, pode ainda ser escrito como o produto de operadores de troca de duas partículas. Exemplo;

$$\begin{aligned} P_{123}\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) &= \psi(x_2, x_3, x_1, \dots, x_N) \\ &= P_{12}P_{13}\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) = P_{12}\psi(x_3, x_2, x_1, \dots, x_N) \\ &= \psi(x_2, x_3, x_1, \dots, x_N). \end{aligned}$$

Se $|\psi\rangle$ é um autoestado de uma hamiltoniana simétrica na troca de partículas, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Então, $PH|\psi\rangle = EP|\psi\rangle$ e, por (VII.11), $HP|\psi\rangle = EP|\psi\rangle$. Portanto, mesmo que $P|\psi\rangle$ não seja o mesmo estado que $|\psi\rangle$, eles são degenerados. Esta é a chamada *degenerescência de troca*. Voltemos agora à eq. (VII.9).

As partículas cuja função de onda é simétrica com relação a troca de i -ésima pela j -ésima entrada (sinal (+) em (VII.9)) são chamadas de *bósons*, enquanto que as antissimétricas (sinal (-) em (VII.9)) são chamadas de *férmions*. É um fato experimental que píons, fótons e núcleos de ^4He são bósons enquanto que elétrons, prótons e nêutrons são férmions. Mais ainda, existe um teorema, *o teorema do spin e estatística*, que estabelece que partículas de spin inteiro são bósons e semi-inteiro são férmions. Lembre-se que ao trocarmos duas partículas entre si, devemos fazê-lo através de todos os seus números quânticos e posições.

Antes de prosseguir na análise das funções simétricas e antissimétricas, vamos analisar duas questões importantes a elas relativas. A 1ª diz respeito à condição sob a qual este efeito é importante enquanto que a 2ª trata do espalhamento de partículas idênticas.

Vamos supor que queiramos estudar o comportamento de dois elétrons, um na localidade A e outro na B . Vamos, por comodidade, assumir que o estado de spin do sistema seja um tripleto e, portanto, se descrevermos a função de onda do sistema por

$$\psi(\mathbf{x}_1, \sigma_1, \mathbf{x}_2, \sigma_2) = \varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\chi_s(\sigma_1, \sigma_2) \quad \text{onde} \quad \chi_s(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (\text{VII.12})$$

a sua parte orbital $\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ deve ser antissimétrica, ou seja, $\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\varphi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$. Como cada um dos elétrons está em uma localidade diferente, podemos dizer que a função orbital é dada por

$$\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_A(\mathbf{x}_1) \varphi_B(\mathbf{x}_2) - \varphi_A(\mathbf{x}_2) \varphi_B(\mathbf{x}_1)], \quad (\text{VII.13})$$

onde as funções φ_A e φ_B estão localizadas (centradas) em A e B , respectivamente. Por exemplo, suponha que este sistema diga respeito a um elétron de um átomo em São Paulo e a um outro elétron de um átomo em Campinas. A questão é: seria nesta circunstância importante levarmos a antissimetização em conta às últimas consequências? Para responder a esta pergunta vamos estudar a densidade de probabilidade de se encontrar um elétron em \mathbf{x} . De acordo com os postulados da mecânica quântica esta probabilidade é dada por

$$\int d^3x_2 |\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)|^2,$$

que representa a densidade de probabilidade do 1º elétron ser encontrado em \mathbf{x} independentemente da posição ocupada pelo 2º, somada a

$$\int d^3x_1 |\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x})|^2,$$

que representa a densidade de probabilidade do 2º elétron ser encontrado em \mathbf{x} independentemente da posição ocupada pelo 1º. Assim,

$$P(\mathbf{x}) = \int d^3x_2 |\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)|^2 + \int d^3x_1 |\varphi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x})|^2, \quad (\text{VII.14})$$

que com o auxílio da (VII.13) nos dá

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}) &= |\varphi_A(\mathbf{x})|^2 \int d^3x_1 |\varphi_B(\mathbf{x}_1)|^2 + |\varphi_B(\mathbf{x})|^2 \int d^3x_2 |\varphi_A(\mathbf{x}_2)|^2 - \\ &- 2\text{Re} \left\{ \varphi_A(\mathbf{x}) \varphi_B^*(\mathbf{x}) \int d^3x_1 \varphi_A(\mathbf{x}_1) \varphi_B^*(\mathbf{x}_1) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{VII.15})$$

Portanto, se não existir uma sobreposição (overlap) apreciável das duas funções, φ_A e φ_B , o último termo de (VII.15) se anula e a antissimetria da função de onda é irrelevante. Entretanto, se esta sobreposição é apreciável, este termo de interferência se torna fundamental. Sem a interferência as partículas são distinguíveis.

Um problema onde a sobreposição obviamente ocorre é num proceso de espalhamento entre duas partículas idênticas, tanto no caso de bósons quanto no de férmions.

1º caso: Vamos considerar o espalhamento de 2 bósons sem spin. Neste caso,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/\hbar} \varphi(\mathbf{r}), \quad (\text{VII.16})$$

onde \mathbf{p} é o momento linear do centro de massa das partículas e $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ a sua coordenada relativa. Como a função ψ é simétrica sob P_{12} , devemos ter

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(-\mathbf{r}), \quad (\text{VII.17})$$

o que implica em que os únicos possíveis autoestados do momento angular relativo sejam pares, ou seja, $\varphi(\mathbf{r}) = F(r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$ onde $l = 2n$ ($n \in \mathbb{N}$). Sem levar em conta a simetria de $\varphi(\mathbf{r})$, deveríamos ter

$$\varphi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r},$$

que deve ser modificada para

$$\varphi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + [f(\theta) + f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (\text{VII.18})$$

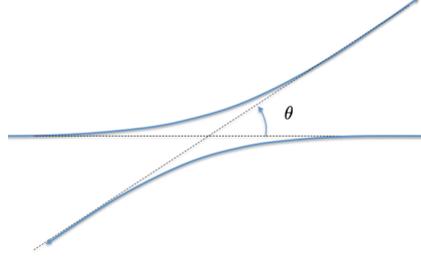
onde usamos que ao trocar as partículas, $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r} \Rightarrow \theta \rightarrow \pi - \theta$. Portanto, a amplitude de espalhamento deve ser substituída pela sua forma simetrizada

$$f_s(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta) \quad (\text{VII.19})$$

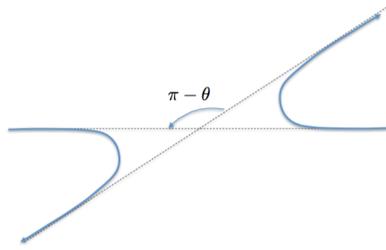
e a seção de choque diferencial é agora

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_s|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}f^*(\theta)f(\pi - \theta), \quad (\text{VII.20})$$

que contém no seu 1º termo o espalhamento



no 2º termo o espalhamento



e, finalmente, no seu 3º termo, a interferência entre as duas possibilidades acima.

2º caso: Vamos, agora, considerar o espalhamento de 2 férmions de spin $s = 1/2$.

No caso de termos um singlete de spins (spinor antissimétrico na troca de 1 por 2) a parte orbital da função de onda é simétrica e, portanto, igual a do sistema de 2 bósons sem spin (1º caso). Assim,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{singlete}} = |f_s|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}f^*(\theta)f(\pi - \theta), \quad (\text{VII.21})$$

Se por outro lado os spins das partículas estiverem em um estado tripleto (simétrico na troca de 1 por 2) teremos a parte orbital antissimétrica e então,

$$\varphi(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + [f(\theta) - f(\pi - \theta)]\frac{e^{ikr}}{r}, \quad (\text{VII.22})$$

o que implica em

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{tripleto}} &= |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 = \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - 2\text{Re}f^*(\theta)f(\pi - \theta). \end{aligned} \quad (\text{VII.23})$$

Já no caso de spins não polarizados a probabilidade de ocorrência dos processos acima em cada um dos canais $s = 0, m_s = 0$ ou $s = 1, m_s = 0, \pm 1$ são iguais, o que nos leva a

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{não-pol}} &= \frac{3}{4}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{tripleto}} + \frac{1}{4}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{singlete}} = \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \text{Re}f^*(\theta)f(\pi - \theta). \end{aligned} \quad (\text{VII.24})$$

VII.1) O espaço de Fock

Para descrever um estado de N corpos vamos considerar a base $|E_1, \dots, E_N\rangle \equiv |E_1\rangle \otimes \dots \otimes |E_N\rangle$ onde $\{E_i\}$ é o conjunto de números quânticos compatível com as simetrias do problema de 1 corpo. Então, cada $E_i = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_\infty$. Exemplo, $E_i \rightarrow \mathbf{k}, s_z$ (momento linear e componente \hat{z} do spin) ou $E_i \rightarrow E$ (energia).

Desta forma temos na representação de "coordenadas"

$$\langle x_k | E_k \rangle \equiv \varphi_{E_k}(x_k). \quad (\text{VII.1.1})$$

Então,

$$\langle E_1, \dots, E_N | \psi(t) \rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \int \dots \int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi(x_1, \dots, x_N, t) \langle E_1 | x_1 \rangle \dots \langle E_N | x_N \rangle. \quad (\text{VII.1.2})$$

Como queremos expandir $|\psi(t)\rangle$ na base $|E_1, \dots, E_N\rangle$ devemos ter

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{E_1, \dots, E_N} C(E_1, \dots, E_N, t) |E_1, \dots, E_N\rangle. \quad (\text{VII.1.3})$$

que comparada com a (VII.1.2) nos dá

$$C(E_1, \dots, E_N) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \int \dots \int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi(x_1, \dots, x_N, t) \varphi_{E_1}^*(x_1) \dots \varphi_{E_N}^*(x_N). \quad (\text{VII.1.4})$$

Na representação de coordenadas

$$\psi(x_1, \dots, x_N, t) = \sum_{E_1, \dots, E_N = \lambda_1}^{\lambda_\infty} C(E_1, \dots, E_N, t) \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_N}(x_N). \quad (\text{VII.1.5})$$

Então, usando a (VII.9) teremos

$$\begin{aligned} & \sum_{E_1, \dots, E_N} C(E_1, \dots, E_i, \dots, E_j, \dots, E_N, t) \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_i}(x_i) \dots \varphi_{E_j}(x_j) \dots \varphi_{E_N}(x_N) = \\ & = \pm \sum_{E_1, \dots, E_N} C(E_1, \dots, E_i, \dots, E_j, \dots, E_N, t) \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_i}(x_j) \dots \varphi_{E_i}(x_j) \dots \varphi_{E_N}(x_N) = \\ & = \pm \sum_{E_1, \dots, E_N} C(E_1, \dots, E_j, \dots, E_i, \dots, E_N, t) \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_j}(x_j) \dots \varphi_{E_i}(x_i) \dots \varphi_{E_N}(x_N), \end{aligned}$$

pois os índices E_i e E_j estão somados. Assim, vemos que

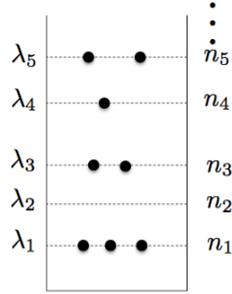
$$C(E_1, \dots, E_i, \dots, E_j, \dots, E_N, t) = \pm C(E_1, \dots, E_j, \dots, E_i, \dots, E_N, t). \quad (\text{VII.1.6})$$

Vamos explorar este fato nos casos das partículas serem bósons ou férmions.

i) Bósons

Consideremos um sistema de N bósons tal que

$$\left. \begin{array}{l} n_1 \text{ bósons em } \lambda_1 \\ n_2 \text{ bósons em } \lambda_2 \\ \vdots \\ n_\infty \text{ bósons em } \lambda_\infty \end{array} \right\} \text{mas } \sum_{i=1}^{\infty} n_i = N,$$



então os $C(E_1, \dots, E_i, \dots, E_j, \dots, E_N, t)$ são tais que

$$C(1, 2, 1, 1, 3, 3, 2, 1, 1, 4, \dots, t) = C(\underbrace{1, 1, 1, \dots, 1}_{n_1}, \underbrace{2, 2, 2, \dots, 2}_{n_2}, \dots, t). \quad (\text{VII.1.6})$$

Assim, podemos definir

$$\bar{C}(n_1, \dots, n_\infty, t) = C(\underbrace{1, 1, 1, \dots, 1}_{n_1}, \underbrace{2, 2, 2, \dots, 2}_{n_2}, \dots, t). \quad (\text{VII.1.7})$$

Como o estado $|\psi\rangle$ deve ser normalizado; $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Então,

$$\begin{aligned} & \sum_{E_1, \dots, E_N} |C(E_1, \dots, E_N, t)|^2 = 1 \\ \Rightarrow & \sum_{n_1, \dots, n_\infty} |\bar{C}(n_1, \dots, n_\infty, t)|^2 \sum_{\substack{E_1, \dots, E_N \\ (n_1, \dots, n_\infty)}} 1 = 1, \quad (\text{VII.1.8}) \end{aligned}$$

onde $\sum_{\substack{E_1, \dots, E_N \\ (n_1, \dots, n_\infty)}}$ é a soma sobre todos os $E_k = (\lambda_1, \dots, \lambda_\infty)$ de tal forma que n_1 partículas estão em λ_1, n_2 partículas estão em λ_2, \dots, n_k partículas estão em λ_k mas $\sum_i n_i = N$. Consequentemente,

$$\sum_{\substack{E_1, \dots, E_N \\ (n_1, \dots, n_\infty)}} 1 = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!}. \quad (\text{VII.1.9})$$

Usando a (VII.1.9) na (VII.1.8) temos

$$\sum_{n_1, \dots, n_\infty} |\bar{C}(n_1, \dots, n_\infty, t)|^2 \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!} = 1, \quad (\text{VII.1.10})$$

que pode, através da definição

$$f(n_1, \dots, n_\infty, t) \equiv \bar{C}(n_1, \dots, n_\infty, t) \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!}}, \quad (\text{VII.1.11})$$

ser reescrita como

$$\sum_{n_1, \dots, n_\infty} |f(n_1, \dots, n_\infty, t)|^2 = 1, \quad (\text{VII.1.12})$$

o que nos leva a escrever a função de onda ψ como

$$\begin{aligned} \psi(x_1, \dots, x_N, t) &= \sum_{E_1, \dots, E_N} C(E_1, \dots, E_N, t) \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_N}(x_N) = \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\infty!}{N!}} \sum_{\substack{E_1, \dots, E_N \\ (n_1, \dots, n_\infty)}} \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_N}(x_N), \end{aligned}$$

ou ainda

$$\psi(x_1, \dots, x_N, t) = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) \phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_N)$$

onde

$$\phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_N) \equiv \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\infty!}{N!}} \sum_{\substack{E_1, \dots, E_N \\ (n_1, \dots, n_\infty)}} \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_N}(x_N). \quad (\text{VII.1.13})$$

Esta função é a representação de coordenadas de um estado abstrato $|n_1, \dots, n_\infty\rangle$ de números de ocupação dos níveis de 1 corpo,

$$\phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_N) = \langle x_1, \dots, x_N | n_1, \dots, n_\infty \rangle. \quad (\text{VII.1.14})$$

Exemplo: Vamos escrever a função de onda de 3 bósons, estando 2 deles ocupando o estado λ_1 e o outro em λ_2 . Neste caso temos $N = 3$, $n_1 = 2$ e $n_2 = 1$ o que implica em $(n_1! n_2! / N!)^{1/2} = 1/\sqrt{3}$ e

$$\begin{aligned} \phi_{2,1,0,\dots}(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{\substack{E_1, E_2, E_3 = \lambda_1 \\ (2,1,0,\dots)}}^{\lambda_2} \varphi_{E_1}(x_1) \varphi_{E_2}(x_2) \varphi_{E_3}(x_3) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_1(x_1) \varphi_1(x_2) \varphi_2(x_3) + \varphi_1(x_1) \varphi_2(x_2) \varphi_1(x_3) + \varphi_2(x_1) \varphi_1(x_2) \varphi_1(x_3)], \quad (\text{VII.1.15}) \end{aligned}$$

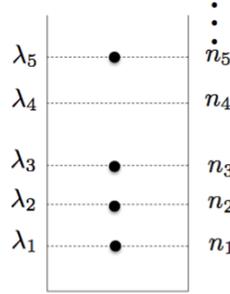
que é uma função de onda totalmente simétrica.

ii) Férmions

Neste caso temos

$$C(E_1 \dots E_i \dots E_j \dots E_n, t) = -C(E_1 \dots E_j \dots E_i \dots E_n, t), \quad (\text{VII.1.16})$$

o que implica em que duas partículas quaisquer não podem ocupar o mesmo estado pois se $E_i = E_j$ a (VII.1.16) diz que $\psi = -\psi$, ou seja, $\psi = 0$. Portanto, se pensarmos na ocupação de um determinado estado λ_i teremos apenas duas possibilidades: $n_i = 0$ ou 1.



Vamos definir

$$\bar{C}(n_1, \dots, n_\infty, t) \equiv C(E_1 \dots < E_i < \dots < E_j < E_N, t). \quad (\text{VII.1.17})$$

Como $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ teremos

$$\sum_{E_1 \dots E_N} |C(E_1 \dots E_N, t)|^2 = \sum_{n_1 \dots n_\infty} |\bar{C}(n_1, \dots, n_\infty, t)|^2 \sum_{\substack{E_1 \dots E_n \\ (n_1 \dots n_\infty)}} = 1,$$

onde $n_i = 0$ ou 1, o que implica em

$$\sum_{\substack{E_1 \dots E_N \\ (n_1 \dots n_\infty)}} 1 = N!. \quad (\text{VII.1.18})$$

Definindo $f(n_1, \dots, n_\infty, t) \equiv \bar{C}(n_1, \dots, n_\infty, t) \sqrt{N!}$ teremos

$$\sum_{n_1 \dots n_\infty} |f(n_1, \dots, n_\infty, t)|^2 = 1$$

e

$$\psi(x_1 \dots x_N, t) = \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1 \dots n_\infty, t) \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\substack{E_1 \dots E_N \\ (n_1 \dots n_\infty)}} \mathcal{A}[\varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_N}(x_N)],$$

onde $\mathcal{A}[*]$ é uma operação de antissimetrização na troca de qualquer i por j (e zero se $i = j$),

$$\Rightarrow \psi(x_1 \dots x_N, t) = \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1 \dots n_\infty, t) \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\substack{E_1 \dots E_N \\ (n_1 \dots n_\infty)}} \epsilon^{E_1 \dots E_N} \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_N}(x_N) \quad (\text{VII.1.19})$$

onde

$$\epsilon^{E_1 \dots E_N} = \begin{cases} 1 & \text{se } E_1 \dots E_N \text{ é uma permutação par dos estados ocupados entre } \lambda_1 \dots \lambda_\infty \\ -1 & \text{se } E_1 \dots E_N \text{ é uma permutação ímpar dos estados ocupados entre } \lambda_1 \dots \lambda_\infty \\ 0 & \text{se } E_i = E_j \end{cases}$$

que, usando a definição de determinante, resulta em

$$\begin{aligned} \phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\substack{E_1 \dots E_N \\ (n_1 \dots n_\infty)}} \epsilon^{E_1 \dots E_N} \varphi_{E_1}(x_1) \dots \varphi_{E_N}(x_N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{E_1}(x_1) & \dots & \varphi_{E_N}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{E_1}(x_N) & \dots & \varphi_{E_N}(x_N) \end{vmatrix}, \quad (\text{VII.1.20}) \end{aligned}$$

que é o conhecido *determinante de Slater*.

Aqui também

$$\phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N) \equiv \langle x_1 \dots x_N | n_1 \dots n_\infty \rangle$$

e

$$\psi(x_1 \dots x_N, t) = \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1 \dots n_\infty, t) \phi_{n_1 \dots n_\infty}(x_1 \dots x_N),$$

ou

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1 \dots n_\infty, t) |n_1 \dots n_\infty\rangle.$$

Então podemos concluir que os estados $|n_1 \dots n_\infty\rangle$ formam a base do que chamamos de espaço do número de ocupação, o *espaço de Fock*. Os estados de N bósons ou férmions podem ser expandidos nesta base com os coeficientes $f(n_1 \dots n_\infty, t)$ acima definidos e a representação de coordenadas destes estados de base é dada por (VII.1.13) para bósons e (VII.1.20) para férmions e ainda

$$\langle n'_1 n'_2 \dots n'_\infty | n_1 \dots n_\infty \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_\infty n'_\infty} \quad (\text{VII.1.21})$$

e

$$\sum_{n_1 \dots n_\infty} |n_1 \dots n_\infty\rangle \langle n_1 \dots n_\infty| = \mathbb{1}.$$

De posse destes resultados podemos optar por trabalhar diretamente no espaço de Fock, o que pode ser feito ao transformarmos todos os operadores para esta representação. O procedimento é direto, já que sabemos representar os estados $|n_1 \dots n_\infty\rangle$ em coordenadas assim como os observáveis de N corpos. Apesar de mais direta, esta dedução requer uma atenção especial nas passagens algébricas, o que nos leva a optar por um caminho alternativo.