

Operadores no espaço de Fock

Como os estados no espaço de Fock são rotulados pelos números de ocupação n_λ e obedecem a (VII.1.21) podemos nos valer do conhecimento já adquirido ao tratar o oscilador harmônico algebricamente e definir operadores número de tal forma que

$$a_\lambda^\dagger a_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle = n_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle \quad (\text{VII.1.22})$$

Entretanto, no caso particular de muitos corpos devemos separar a nossa discussão da criação destes operadores em dois casos:

i) Bósons

No caso bosônico, como já mencionamos antes, os números de ocupação são quaisquer desde que $\sum_\lambda n_\lambda = N$, o número total de partículas. Assim, podemos imaginar que aumentar o número de ocupação do estado λ seria análogo a aumentar a energia de um λ -ésimo oscilador harmônico. Então a analogia seria entre o número de ocupação de um λ -ésimo estado de 1 corpo e o número de quanta de energia em um oscilador rotulado por λ .

Com essa analogia podemos definir operadores b_λ e b_λ^\dagger tais que

$$[b_\lambda, b_{\lambda'}] = 0$$

e

$$[b_\lambda, b_{\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (\text{VII.1.23})$$

Com essa álgebra e o nosso conhecimento prévio da física do oscilador harmônico podemos mostrar que

$$\begin{aligned} b_\lambda^\dagger b_\lambda |n_\lambda\rangle &= n_\lambda |n_\lambda\rangle \\ b_\lambda^\dagger |n_\lambda\rangle &= \sqrt{n_\lambda + 1} |n_\lambda + 1\rangle \\ b_\lambda |n_\lambda\rangle &= \sqrt{n_\lambda} |n_\lambda - 1\rangle \end{aligned} \quad (\text{VII.1.24})$$

ou

$$\begin{aligned} b_\lambda^\dagger b_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle &= n_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle \\ b_\lambda^\dagger |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle &= \sqrt{n_\lambda + 1} |n_1 \dots n_\lambda + 1 \dots n_\infty\rangle \\ b_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle &= \sqrt{n_\lambda} |n_1 \dots n_\lambda - 1 \dots n_\infty\rangle \end{aligned} \quad (\text{VII.1.25})$$

e ainda

$$|n_1 \dots n_\infty\rangle = \frac{b_1^{\dagger n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{b_2^{\dagger n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots \frac{b_\infty^{\dagger n_\infty}}{\sqrt{n_\infty!}} \underbrace{|0 \dots 0\rangle}_{\text{v\u00e1cuo}}. \quad (\text{VII.1.26})$$

ii) F\u00e9rmions

No caso fermi\u00f4nico n\u00e3o podemos usar a mesma \u00e1lgebra que em (VII.1.23). A raz\u00e3o \u00e9 simples; o n\u00famero de ocupa\u00e7\u00e3o $n_\lambda = 0$ ou 1. Vamos, ent\u00e3o, introduzir operadores a_λ e a_λ^\dagger tais que

$$\{a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger\} \equiv a_\lambda a_{\lambda'}^\dagger + a_{\lambda'}^\dagger a_\lambda = \delta_{\lambda\lambda'}$$

e

$$\{a_\lambda, a_{\lambda'}\} = \{a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger\} = 0, \quad (\text{VII.1.27})$$

onde $\{A, B\}$ acima definido \u00e9 o anticomutador de A com B . Desta forma temos

$$a_\lambda^2 = a_\lambda^{\dagger 2} = 0$$

e

$$a_\lambda^\dagger a_\lambda = 1 - a_\lambda a_\lambda^\dagger. \quad (\text{VII.1.28})$$

Como $a^\dagger a = (a^\dagger a)^\dagger$ (operador hermitiano), vamos estudar o problema

$$a^\dagger a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle. \quad (\text{VII.1.29})$$

Usando a (VII.1.28) podemos escrever

$$\begin{aligned} (a^\dagger a)^2 &= a^\dagger a a^\dagger a \\ &= a^\dagger (1 - a^\dagger a) a \\ &= a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger a a \\ &= a^\dagger a \\ \Rightarrow (a^\dagger a)^2 |\alpha\rangle &= \alpha^2 |\alpha\rangle \\ &= \alpha |\alpha\rangle \\ \Rightarrow (\alpha^2 - \alpha) |\alpha\rangle &= 0 \\ \Rightarrow \alpha &= 0 \text{ ou } 1. \end{aligned}$$

Assim, só há 2 auto estados de $a^\dagger a$;

$$a^\dagger a |1\rangle = |1\rangle \quad \text{e} \quad a^\dagger a |0\rangle = 0. \quad (\text{VII.1.30})$$

O estado $a^\dagger |0\rangle$ é tal que

$$\begin{aligned} a^\dagger a (a^\dagger |0\rangle) &= (1 - a a^\dagger) a^\dagger |0\rangle = a^\dagger |0\rangle \\ \Rightarrow a^\dagger |0\rangle &= \beta |1\rangle, \end{aligned}$$

que quando normalizado nos dá

$$\begin{aligned} \langle 0 | a a^\dagger | 0 \rangle &= 1 \\ \Rightarrow |\beta|^2 &= 1 \\ \Rightarrow a^\dagger |0\rangle &= |1\rangle, \quad (\text{VII.1.31}) \end{aligned}$$

a menos de uma fase que tomamos = 1.

Por outro lado, $a |1\rangle$ é tal que

$$\begin{aligned} a^\dagger a (a |1\rangle) &= (1 - a a^\dagger) a |1\rangle \\ &= a |1\rangle - a |1\rangle \\ &= 0 \\ \Rightarrow a |1\rangle &= \gamma |0\rangle, \end{aligned}$$

que quando normalizado nos dá

$$\begin{aligned} \langle 1 | a^\dagger a | 1 \rangle &= 1 \\ \Rightarrow |\gamma|^2 &= 1 \\ \Rightarrow a |1\rangle &= |0\rangle, \quad (\text{VII.1.32}) \end{aligned}$$

a menos de uma fase que tomamos = 1.

Note que a e a^\dagger particularizam as fórmulas $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ e $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ para $n = 0, 1$.

Assim podemos definir

$$|n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = a_1^{\dagger n_1} \dots a_\infty^{\dagger n_\infty} |0, \dots, 0\rangle,$$

nesta ordem por convenção. Portanto, usando (VII.1.27),

$$\begin{aligned} a_\lambda |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle &= (-)^{n_1+n_2+\dots+n_{\lambda-1}} a_1^{\dagger n_1} \dots a_\lambda a_\lambda^{\dagger n_\lambda} \dots a_\infty^{\dagger n_\infty} |0 \dots 0\rangle \\ &= \begin{cases} (-1)^{S(\lambda)} |\dots n_\lambda - 1 \dots\rangle & \text{se } n_\lambda = 1 \\ 0 & \text{se } n_\lambda = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Analogamente,

$$a_\lambda^\dagger |n_1 \dots n_\lambda \dots n_\infty\rangle = \begin{cases} (-1)^{S(\lambda)} |\dots n_\lambda + 1 \dots\rangle & \text{se } n_\lambda = 0 \\ 0 & \text{se } n_\lambda = 1. \end{cases}$$

Acima definimos $S(\lambda) = n_1 + n_2 + \dots + n_{\lambda-1}$.

Portanto, podemos sempre escrever a base do espaço de Fock, $|n_1 \dots n_\infty\rangle$, como

$$|n_1 \dots n_\infty\rangle = \frac{c_1^{\dagger n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{c_2^{\dagger n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots \frac{c_\infty^{\dagger n_\infty}}{\sqrt{n_\infty!}} |0 \dots 0\rangle, \quad (\text{VII.1.33})$$

onde $[c_i, c_j]_{(\mp)} = [c_i^\dagger, c_j^\dagger]_{(\mp)}$ e $[c_i, c_j^\dagger]_{(\mp)} = \delta_{ij}$. O sinal $(-)$ vale para bósons (comutação, $n_i \in \mathbb{N}$) e $(+)$ vale para férmions (anticomutação, $n_i = 0, 1$).

Uma outra forma de representar os operadores de criação e destruição no espaço de Fock é através do conceito de *operador de campo*. Estes operadores são definidos através dos autoestados (funções de onda) de 1 corpo como

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{x}) &\equiv \sum_k \varphi_k(\mathbf{x}) c_k \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) &\equiv \sum_k \varphi_k^*(\mathbf{x}) c_k^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{VII.1.34})$$

onde $[c_k, c_{k'}^\dagger]_{(\mp)} = \delta_{kk'}$ e $\varphi_k(\mathbf{x})$ pode ser um spinor. No caso de $k = \{\mathbf{k}, s_z\}$ temos

$$\begin{aligned} \varphi_k(\mathbf{x}) &= \begin{bmatrix} \varphi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \varphi_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \\ &= \varphi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{x}) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \varphi_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{x}) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

e, portanto, o operador de campo é spinorial

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{x}) \\ \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \quad (\text{VII.1.35})$$

com $\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x}) c_{\mathbf{k}\alpha}$; $\alpha = \uparrow$ ou \downarrow .

Pelas relações de comutação ou anticomutação dos c_i e ortogonalidade dos auto estados $\varphi_i(\mathbf{x})$ podemos constatar que

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}\beta}^*(\mathbf{y}) [c_{\mathbf{k}\alpha}, c_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger]_{\mp} \\ &= \delta_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}\alpha}^*(\mathbf{y}) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \end{aligned} \quad (\text{VII.1.36})$$

e $[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta(\mathbf{y})]_{\mp} = [\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = 0$.

Os operadores de campo podem ser encarados como transformadas de Fourier generalizadas dos operadores de criação e destruição nos autoestados $\varphi_k(\mathbf{x})$ e sua interpretação é de operadores de criação ou destruição de partículas

no ponto \mathbf{x} . Portanto, o papel de a_k e $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ (ou a_k^\dagger e $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$) é muito semelhante: ambos destroem (ou criam) partículas e a única diferença está na representação considerada. Se as relações de comutação ou anticomutação envolvem deltas de Kronecker ou Dirac depende da representação escolhida ser discreta ou contínua.

A representação de operadores no espaço de Fock, discreta ou contínua, pode ser estendida ainda mais. Vamos, para tanto, analisar o estado de N corpos nas representações discreta ou contínua.

Como vimos, o estado de N -partículas é, numa versão discreta, escrito como

$$|\psi_N\rangle = \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1 \dots n_\infty) \frac{a_1^{\dagger n_1}}{\sqrt{n_1!}} \dots \frac{a_\infty^{\dagger n_\infty}}{\sqrt{n_\infty!}} |0\rangle, \quad (\text{VII.1.37})$$

com $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$ ($n_i = 0, 1$ para férmions).

Por outro lado também sabemos pela (VII.1.3) que

$$|\psi_N\rangle = \sum_{E_1 \dots E_N} C(E_1 \dots E_N) |E_1 \dots E_N\rangle.$$

No limite contínuo temos que

$$|\psi_N\rangle = \int \dots \int dE_1 \dots dE_N C(E_1 \dots E_N) |E_1 \dots E_N\rangle, \quad (\text{VII.1.38})$$

com $\int \dots \int dE_1 \dots dE_N |C(E_1 \dots E_N)|^2 = 1$. O que queremos é poder escrever (VII.1.38) de forma análoga a (VII.1.37) o que pode ser feito se encontramos $\bar{C}(E_1 \dots E_N)$ tal que

$$|\psi_N\rangle = \int \dots \int dE_1 \dots dE_N \bar{C}(E_1 \dots E_N) a^\dagger(E_1) \dots a^\dagger(E_N) |0\rangle \quad (\text{VII.1.39})$$

e os operadores $a(E)$ no contínuo são tais que

$$[a(E), a^\dagger(E')]_{\mp} = \delta(E - E'). \quad (\text{VII.1.40})$$

Vamos definir os operadores discretos a_{E_0} como

$$a_{E_0} = \frac{1}{\sqrt{\Delta E_0}} \int_{\Delta E_0} a(E) dE, \quad (\text{VII.1.41})$$

de forma que

$$[a_{E_0}, a_{E'_0}^\dagger]_{\mp} = \frac{1}{\sqrt{\Delta E_0}} \frac{1}{\sqrt{\Delta E'_0}} \int_{\Delta E_0} \int_{\Delta E'_0} dE dE' [a(E), a^\dagger(E')]_{\mp},$$

que, com o auxílio de (VII.1.40), nos dá

$$[a_{E_0}, a_{E'_0}^\dagger]_{\mp} = \delta_{E_0 E'_0}, \quad (\text{VII.1.42})$$

que é o resultado desejado no caso discreto.

Normalizando $|\psi_N\rangle$ em (VII.1.39) temos

$$\begin{aligned} \langle \psi_N | \psi_N \rangle &= \int \dots \int dE' \dots dE'_N \int \dots \int dE_1 \dots dE_N \bar{C}^*(E'_1 \dots E'_N) \bar{C}(E_1 \dots E_N) \times \\ &\times \langle 0 | a(E'_N) \dots a(E'_1) a^\dagger(E_1) \dots a^\dagger(E_N) | 0 \rangle = 1. \end{aligned} \quad (\text{VII.1.43})$$

Usando as relações de comutação ou anticomutação para passar todos os operadores de destruição para a direita dos de criação, pode-se mostrar que esta integral se reduz a

$$\langle \psi_N | \psi_N \rangle = \int \dots \int dE_1 \dots dE_N |\overline{C}(E_1 \dots E_N)|^2 N! = 1, \quad (\text{VII.1.44})$$

que comparada à normalização de $|\psi_N\rangle$ em (VII.1.38) nos dá

$$\overline{C}(E_1 \dots E_N) = \frac{C(E_1 \dots E_N)}{\sqrt{N!}}, \quad (\text{VII.1.45})$$

o que nos permite reescrever (VII.1.39) como

$$\begin{aligned} |\psi_N\rangle &= \int \dots \int dE_1 \dots dE_N C(E_1 \dots E_N) \frac{a^\dagger(E_1) \dots a^\dagger(E_N)}{\sqrt{N!}} |0\rangle \\ &\Rightarrow |E_1 \dots E_N\rangle_F \equiv \frac{a^\dagger(E_1) \dots a^\dagger(E_N)}{\sqrt{N!}} |0\rangle, \quad (\text{VII.1.46}) \end{aligned}$$

onde introduzimos a notação $|E_1 \dots E_N\rangle_F$ para diferenciar este ket de $|E_1 \dots E_N\rangle = |E_1\rangle \otimes \dots \otimes |E_N\rangle$. O primeiro ket carrega na sua definição as propriedades de simetria (para bósons) ou antissimetria (para férmions) na troca de E_i por E_j , ou seja, podemos encará-lo como a representação do segundo ket no espaço de Fock. Assim sendo, iremos omitir o subscrito F de $|E_1 \dots E_N\rangle_F$ e usar a representação de $|E_1 \dots E_N\rangle$ de acordo com o espaço onde estivermos trabalhando.

Em termos dos operadores de campo teremos

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{x}) &= \int dE \varphi_E(\mathbf{x}) a(E) \\ \Rightarrow a(E) &= \int d^3x \varphi_E^*(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

ou ainda, pela (VII.1.46),

$$\begin{aligned} |\psi_N\rangle &= \int dE_1 \dots dE_N \frac{C(E_1 \dots E_N)}{\sqrt{N!}} \int d^3x_1 \dots d^3x_N \varphi_{E_1}(\mathbf{x}_1) \dots \varphi_{E_N}(\mathbf{x}_N) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_N) |0\rangle \\ &= \int d^3x_1 \dots d^3x_N \frac{1}{\sqrt{N!}} \left\{ \int dE_1 \dots dE_N C(E_1 \dots E_N) \varphi_{E_1}(\mathbf{x}_1) \dots \varphi_{E_N}(\mathbf{x}_N) \right\} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_N) |0\rangle \\ &= \int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N) \frac{\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_N)}{\sqrt{N!}} |0\rangle, \end{aligned}$$

que nos permite definir

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N\rangle_F \equiv \frac{\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_N)}{\sqrt{N!}} |0\rangle \quad (\text{VII.1.47})$$

e escrever

$$|\psi_N\rangle = \int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N) |\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N\rangle_F.$$

Convém notar que na expressão acima $|\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N\rangle_F$ também carrega na sua definição as propriedades de simetria (para bósons) ou antissimetria (para férmions) na troca de \mathbf{x}_i por \mathbf{x}_j . Aqui também $|\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N\rangle_F$ é a representação de $|\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N\rangle$ no espaço de Fock o que, seguindo a argumentação após (VII.1.46), nos leva a omitir o subscrito F também neste caso.

A representação (VII.1.47) será de grande utilidade ao descrevermos operadores de muitos corpos no espaço de Fock o que será feito através do conceito do operador densidade reduzido.

Um conceito muito importante em mecânica quântica e em mecânica estatística quântica é o do operador densidade que é definido como

$$\hat{\rho} \equiv \sum_{\psi} p_{\psi} |\psi\rangle \langle \psi|, \quad (\text{VII.1.48})$$

onde p_ψ é uma probabilidade clássica de o sistema ser encontrado no estado $|\psi\rangle$; $\sum_{\psi} p_\psi = 1$. No caso de certeza de se encontrar o sistema em um dado $|\psi\rangle$, $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ e diz-se que o sistema encontra-se num estado puro. Em caso contrário temos uma mistura estatística.

O valor médio de qualquer observável é dado por

$$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle = \text{tr}(\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}), \quad (\text{VII.1.49})$$

que, na representação de coordenadas e para um estado puro (a generalização para a mistura estatística é imediata) se torna

$$\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle = \int \dots \int dx_1 \dots dx_N \int \dots \int dy_1 \dots dy_N \langle x_1 \dots x_N | \psi \rangle \langle \psi | y_1 \dots y_N \rangle \langle x_1 \dots x_N | \hat{\mathcal{O}} | y_1 \dots y_N \rangle \quad (\text{VII.1.50})$$

onde definimos $\langle x_1 \dots x_N | \psi \rangle \langle \psi | y_1 \dots y_N \rangle \equiv \rho(x_1 \dots x_N; y_1 \dots y_N)$.

Em nossa notação, $\int dx_i \equiv \sum_{\alpha_i} \int d^3x_i$.

Vamos considerar os nossos resultados para outros casos.

Se $\hat{\mathcal{O}} = \sum_i \hat{\mathcal{O}}_i \equiv \hat{\mathcal{O}}_1$. Temos

$$\langle y_1 \dots y_N | \hat{\mathcal{O}} | x_1 \dots x_N \rangle = \sum_i \delta(x_1 - y_1) \dots \mathcal{O}(y_i; x_i) \delta(x_N - y_N), \quad (\text{VII.1.51})$$

enquanto que se $\hat{\mathcal{O}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{\mathcal{O}}_{ij} \equiv \hat{\mathcal{O}}_2$ temos

$$\langle y_1 \dots y_N | \hat{\mathcal{O}} | x_1 \dots x_N \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \delta(x_1 - y_1) \dots \mathcal{O}(y_i, y_j; x_i, x_j) \dots \delta(x_N - y_N). \quad (\text{VII.1.52})$$

Então se $\hat{\mathcal{O}} = \hat{\mathcal{O}}_1$

$$\langle\hat{\mathcal{O}}_1\rangle = \sum_i \int \dots \int dx_1 \dots dx_{i-1} dx_{i+1} \dots dx_N \int \rho(x_1 \dots x_i \dots x_N; x_1 \dots y_i \dots x_N) \mathcal{O}(y_i; x_i) dx_i dy_i, \quad (\text{VII.1.53})$$

e se $\hat{\mathcal{O}} = \hat{\mathcal{O}}_2$ a (VII.1.50) e (VII.1.52) nos dão

$$\begin{aligned} \langle\hat{\mathcal{O}}_2\rangle &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \dots \int dx_1 \dots dx_{i-1} dx_{i+1} \dots dx_{j-1} dx_{j+1} \dots dx_N \\ &\quad \iint dx_i dx_j dy_i dy_j \rho(x_1 \dots x_i \dots x_j \dots x_N; x_1 \dots y_i \dots y_j \dots x_N) \mathcal{O}(y_i, y_j; x_i, x_j). \end{aligned} \quad (\text{VII.1.54})$$

Como $\rho(x_1 \dots x_N; y_1 \dots y_N) = \psi(x_1 \dots x_N) \psi^*(y_1 \dots y_N)$, a troca de qualquer par (x_k, y_k) por (x_n, y_n) não irá alterar o resultado já que as funções de onda são simétricas ou antissimétricas na troca de 2 partículas. Desta forma podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle\hat{\mathcal{O}}_1\rangle &= \sum_i \iint \rho_1(x_i; y_i) \mathcal{O}(y_i, x_i) dx_i dy_i \\ &\equiv \iint dx dy \tilde{\rho}_1(x; y) \mathcal{O}(y, x), \end{aligned} \quad (\text{VII.1.55})$$

onde

$$\tilde{\rho}_1(x; y) = N \int dx_2 \dots dx_N \rho(x, x_2 \dots x_N; y, x_2 \dots x_N)$$

é o operador densidade reduzido de 1-partícula e

$$\begin{aligned}\langle \hat{O}_2 \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \iiint \rho_2(x_i, x_j; y_i, y_j) \mathcal{O}(y_i y_j; x_i x_j) dx_i dx_j dy_i dy_j \\ &\equiv \frac{1}{2} \iiint \tilde{\rho}_2(x, x'; y, y') \mathcal{O}(y, y'; x, x') dx dx' dy dy', \quad (\text{VII.1.56})\end{aligned}$$

onde

$$\tilde{\rho}_2(x, x'; y, y') = N(N-1) \int dx_3 \dots dx_N \rho(x, x', x_3 \dots x_N; y, y', x_3 \dots x_N),$$

é o operador densidade reduzido de 2-partículas.

Os operadores $\tilde{\rho}_1(x; y)$ e $\tilde{\rho}_2(x, x'; y, y')$ podem ainda ser representados em termos de operadores de campo.

Usando a (VII.1.47) podemos escrever

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_1(x; y) &= \frac{N}{N!} \int dx_2 \dots dx_N \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \dots \hat{\psi}^\dagger(x_N) | 0 \rangle \langle 0 | \hat{\psi}(x_N) \dots \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x) | \psi \rangle \\ &= \int dx_2 \dots dx_N \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \frac{\hat{\psi}^\dagger(x_2) \dots \hat{\psi}^\dagger(x_N)}{\sqrt{(N-1)!}} | 0 \rangle \langle 0 | \frac{\hat{\psi}(x_N) \dots \hat{\psi}(x_2)}{\sqrt{(N-1)!}} \hat{\psi}(x) | \psi \rangle \\ &= \int dx_2 \dots dx_N \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) | x_2 \dots x_N \rangle \langle x_2 \dots x_N | \hat{\psi}(x) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}(x) | \psi \rangle \quad (\text{VII.1.57})\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_2(x, x'; y, y') &= \frac{N(N-1)}{N!} \int dx_3 \dots dx_N \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}^\dagger(y') \dots \hat{\psi}^\dagger(x_N) | 0 \rangle \langle 0 | \hat{\psi}(x_N) \dots \hat{\psi}(x_3) \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(y') | \psi \rangle \\ &= \int dx_3 \dots dx_N \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}^\dagger(y') \frac{\hat{\psi}^\dagger(x_3) \dots \hat{\psi}^\dagger(x_N)}{\sqrt{(N-2)!}} | 0 \rangle \langle 0 | \frac{\hat{\psi}(x_N) \dots \hat{\psi}(x_3)}{\sqrt{(N-2)!}} \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(y') | \psi \rangle \\ &= \int dx_3 \dots dx_N \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}^\dagger(y') | x_3 \dots x_N \rangle \langle x_3 \dots x_N | \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(y') | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}^\dagger(y') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(y') | \psi \rangle, \quad (\text{VII.1.58})\end{aligned}$$

o que nos permite reescrever (VII.1.55) e (VII.1.56) como

$$\langle \hat{O}_1 \rangle = \iint \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}(x) | \psi \rangle \mathcal{O}(y; x) dx dy$$

e

$$\langle \hat{O}_2 \rangle = \frac{1}{2} \iiint \langle \psi | \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}^\dagger(y') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) | \psi \rangle \mathcal{O}(y, y'; x, x') dx dx' dy dy'.$$

Nestas expressões para $\langle \hat{O}_1 \rangle$ e $\langle \hat{O}_2 \rangle$ os únicos termos que são operadores dependem de $\hat{\psi}$ e $\hat{\psi}^\dagger$. $\mathcal{O}(x; y)$ e $\mathcal{O}(x, x'; y, y')$ são funções que representam, em coordenadas, o elemento de matriz para apenas uma ou duas partículas. Todo o caráter da estatística bosônica ou fermiônica está em $\langle \psi | (*) | \psi \rangle$. Portanto, o termo $(*)$ em $\langle \hat{O}_1 \rangle$ ou $\langle \hat{O}_2 \rangle$ é a representação de \hat{O}_1 ou \hat{O}_2 no espaço de Fock. Assim, podemos escrever de forma bem geral

$$\hat{O}_1 = \sum_{\alpha_1 \beta_1} \iint d^3 x_1 d^3 y_1 \hat{\psi}_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) \mathcal{O}_{\alpha_1 \beta_1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) \hat{\psi}_{\beta_1}(\mathbf{y}_1) \quad (\text{VII.1.59})$$

e

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1 \beta_1 \alpha_2 \beta_2} \iiint d^3 x_1 d^3 x_2 d^3 y_1 d^3 y_2 \hat{\psi}_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{x}_2) \mathcal{O}_{\alpha_1 \alpha_2; \beta_1 \beta_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) \hat{\psi}_{\beta_2}(\mathbf{y}_2) \hat{\psi}_{\beta_1}(\mathbf{y}_1). \quad (\text{VII.1.60})$$

Esta representação pode ser generalizada para um operador de N -corpos como

$$\begin{aligned} \hat{O}_N &= \frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1 \beta_1 \dots \alpha_N \beta_N} \int \dots \int d^3 x_1 d^3 y_1 \dots d^3 x_N d^3 y_N \hat{\psi}_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) \dots \hat{\psi}_{\alpha_N}^\dagger(\mathbf{x}_N) \times \\ &\times \mathbb{O}_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N; \beta_1 \beta_2 \dots \beta_N}(\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N; \mathbf{y}_1 \mathbf{y}_2 \dots \mathbf{y}_N) \hat{\psi}_{\beta_N}(\mathbf{y}_N) \dots \hat{\psi}_{\beta_2}(\mathbf{y}_2) \hat{\psi}_{\beta_1}(\mathbf{y}_1). \end{aligned} \quad (\text{VII.1.61})$$

Em geral estaremos interessados em operadores de 1 ou 2 corpos como os que aparecem na hamiltoniana (VII.2). Neste caso, os operadores de 1 corpo $\sum_i T(x_i)$ e $\sum_i U(x_i)$ são diagonais nas coordenadas e no spin, o que nos leva a (também independente do spin)

$$\mathbb{O}_{\alpha_1 \beta_1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) = \delta_{\alpha_1 \beta_1} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1) \mathbb{O}(\mathbf{x}_1)$$

e a (VII.1.59) transforma-se em

$$\hat{O}_1 = \sum_{\alpha} \int d^3 x \hat{\psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{x}) \mathbb{O}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}). \quad (\text{VII.1.62})$$

Por outro lado, a energia potencial de interação entre as partículas é da forma

$$\mathbb{O}_{\alpha_1 \alpha_2; \beta_1 \beta_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2) = \delta_{\alpha_1 \beta_1} \delta_{\alpha_2 \beta_2} \mathbb{O}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{y}_1) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}_2)$$

e a (VII.1.60) pode ser reescrita como

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \iint \hat{\psi}_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{x}_2) \mathbb{O}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1) d^3 x_1 d^3 x_2. \quad (\text{VII.1.63})$$

Convém notar que a ordem em que os operadores de campo aparece deve ser preservada na forma que a deduzimos. A troca da ordem no caso dos bósons é inócua mas não no caso dos férmions. Operadores fermiônicos anticomutam e isso causaria uma mudança de sinal na definição do operador.

De posse da representação dos operadores em termos de campos podemos escrevê-la em qualquer outra referente a estados de 1 corpo, ou seja, se usarmos a definição dos operadores de campo como em (VII.1.34) em (VII.1.62) e (VII.1.63) teremos

$$\begin{aligned} \hat{O}_1 &= \sum_{\alpha} \int d^3 x \hat{\psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{x}) \mathbb{O}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \int d^3 x \varphi_{\mathbf{k} \alpha}^*(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k} \alpha}^\dagger \mathbb{O}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}' \alpha}(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k} \alpha} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k} \alpha}^\dagger \langle \mathbf{k} | \mathbb{O} | \mathbf{k}' \rangle a_{\mathbf{k}' \alpha}, \end{aligned} \quad (\text{VII.1.64})$$

onde

$$\langle \mathbf{k} | \mathbb{O} | \mathbf{k}' \rangle = \int d^3 x \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \mathbb{O}(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x})$$

e

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1 \alpha}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \beta}^\dagger \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \mathbb{O} | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle a_{\mathbf{k}_4 \beta} a_{\mathbf{k}_3 \alpha},$$

onde

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \mathbb{O} | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle = \iint d^3 x d^3 y \varphi_{\mathbf{k}_1}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{y}) \mathbb{O}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_{\mathbf{k}_4}(\mathbf{y}) \varphi_{\mathbf{k}_3}(\mathbf{x}). \quad (\text{VII.1.65})$$

De forma geral temos

$$\begin{aligned} \hat{O}_1 &= \sum_{ij} c_i^\dagger \langle i | \mathbb{O} | j \rangle c_j \\ \hat{O}_2 &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger \langle ij | \mathbb{O} | kl \rangle c_l c_k \\ \hat{O}_3 &= \frac{1}{3!} \sum_{ijnklm} c_i^\dagger c_j^\dagger c_n^\dagger \langle injn | \mathbb{O} | klm \rangle c_m c_l c_k \end{aligned}$$

etc.

onde os índices $i, j \dots$ representam o conjunto dos números quânticos apropriados do problema de 1 corpo (por exemplo, $i = \mathbf{k}, s_z$)

Exemplos:

i) Densidade de partículas

No espaço de Hilbert usual temos $n(\mathbf{x}) = \sum_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$.

Então, no espaço de Fock teremos

$$\begin{aligned}\hat{n}(\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha} \int d^3x' \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}') \\ &= \sum_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}). \quad (\text{VII.1.67})\end{aligned}$$

Portanto, o operador número total de partículas é dado por

$$\begin{aligned}\hat{N} &= \int d^3x \hat{n}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{\alpha} \int d^3x \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \quad (\text{VII.1.68})\end{aligned}$$

ou ainda, usando a representação de ondas planas temos pela (VII.1.34)

$$\hat{N} = \sum_{\alpha \mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\alpha}. \quad (\text{VII.1.69})$$

ii) Densidade de spin

No espaço de Hilbert usual temos $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = \sum_i \sigma_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$.

Então, no espaço de Fock teremos

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) &= \int \sum_{\alpha\beta} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}') \sigma_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}_{\beta}(\mathbf{x}') d^3x' \\ &= \sum_{\alpha\beta} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \sigma_{\alpha\beta} \hat{\psi}_{\beta}(\mathbf{x}) \quad (\text{VII.1.70}) \\ &\Rightarrow \mathbf{S}(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})\end{aligned}$$

e

$$\mathbf{S}_{\text{total}} = \int d^3x \sum_{\alpha\beta} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \hat{\psi}_{\beta}(\mathbf{x}),$$

que na representação de ondas planas se escreve

$$\mathbf{S}_{\text{total}} = \sum_{\alpha\beta} a_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} a_{\mathbf{k}\beta}. \quad (\text{VII.1.71})$$